現代の量子力学

(下)

J. J. Sakurai 著
(桜井　純)

San Fu Tuan 編
(段 三 孚)

桜 井 明 夫 訳

物理学叢書
57

吉 岡 書 店

Modern Quantum Mechanics

J. J. Sakurai

Late, University of California, Los Angeles

San Fu Tuan, Editor

University of Hawaii, Manoa

The Benjamin/Cummings Publishing Company, Inc.
Menlo Park, California • Reading, Massachusetts
Don Mills, Ontario • Wokingham, U.K. • Amsterdam • Sydney
Singapore • Tokyo • Mexico City • Bogota • Santiago • San Juan

目　次

（下　巻）

（上巻）主要内容

第 4 章

量子力学における対称性

回転の理論に関して詳しく学んできたので，今後さらに一般的観点から，対称性と縮退および保存則との関連を議論していこう．この非常に重要な課題を今迄わざと延ばしてきたのは，第 3 章の回転対称性を例として用いながら議論を進めたかったからである．

4.1 対称性，保存則，縮退

古典物理における対称性

はじめに古典物理における対称性と保存則の概念を，基本的なところから復習してみよう．古典力学のラグランジアン形式では，一般化座標 q_i とそれに対応する一般化された速度 $\dot{q}_i$ の関数であるラグランジアン L から出発する．L が平行移動

$$q_i \to q_i + \delta q_i \tag{4.1.1}$$

に対して不変なときは，必然的に

$$\frac{\partial L}{\partial q_i} = 0 \tag{4.1.2}$$

である．このときラグランジュの方程式，$d/dt(\partial L/\partial \dot{q}_i) - \partial L/\partial q_i = 0$ によって

$$\frac{dp_i}{dt} = 0 \tag{4.1.3}$$

が成り立つ．ここで p_i は

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \tag{4.1.4}$$

で定義される正準運動量である．すなわち，L が平行移動（4.1.1）に対して不変なときには保存量があり，それは q_i に共役な正準運動量である．

同じように，q_i と p_i の関数とみなされる H に基づくハミルトニアン形式では

$$\frac{dp_i}{dt} = 0 \tag{4.1.5}$$

が

$$\frac{\partial H}{\partial q_i} = 0 \tag{4.1.6}$$

のとき常に成り立つ．すなわちハミルトニアンが q_i にあからさまに依存しないとき，——つまり H が $q_i \to q_i + \delta q_i$ に対して対称的であるとき——保存量が存在する．

量子力学における対称性

すでに学んできたように量子力学では平行移動や回転操作に，**ユニタリー演算子**，例えば $\mathscr{S}$ を関連させる．物理系それ自身に $\mathscr{S}$ に対応する対称性があるか否かに拘らず，$\mathscr{S}$ を**対称演算子**（symmetry operator）と呼ぶのが習慣である．さらに対称操作が恒等変換と無限小だけ異なるとき，その対称演算子のエルミート生成演算子を G とすれば，前に学んだように

$$\mathscr{S} = 1 - \frac{i\varepsilon}{\hbar}G \tag{4.1.7}$$

と書ける．ここで H が $\mathscr{S}$ に関して不変であるとしよう．すると

$$\mathscr{S}^{\dagger} H \mathscr{S} = H \tag{4.1.8}$$

であるが，これは

$$[G, H] = 0 \tag{4.1.9}$$

と同値である．ハイゼンベルクの運動方程式を用いると，これより

$$\frac{dG}{dt} = 0 \tag{4.1.10}$$

が得られる．したがって G は運動の定数である．例えば H が平行移動に関して不変であると運動量が運動の定数となる．また H が回転に関して不変であると，角運動量が運動の定数となる．

G が H と交換するとき，(4.1.9) と G の保存との関連を G の固有ケットの観点から見るのは教訓的である．系が時刻 t_0 で G の固有状態にあるとする．これより後の時刻でのケットは時間発展の演算子をかけることによって

$$|g', t_0 ; t> = U(t, t_0)|g'> \tag{4.1.11}$$

のように得られるが，これも G の固有状態であり，同じ固有値 g' を持つ．つまり一度 G の固有ケットであったケットは，ずっと G の固有ケットであって同じ固有値を持つ．この証明はきわめて簡単である．(4.1.9) と (4.1.10) は，G と時間発展の演算子とが交換することを意味しているので

$$G[U(t, t_0)|g'>] = U(t, t_0)G|g'> = g'[U(t, t_0)|g'>] \tag{4.1.12}$$

が成り立つ．

縮 退

次に縮退という概念を取り上げよう．縮退は古典力学のレベルでも――例えばケプラーの問題で閉じた軌道（歳差運動をしない軌道）を議論するときに（Goldstein, 1980）――問題になるが，この概念は量子力学でなお一層重要な役割を果す．ここで，ある対称演算子に対して

$$[H, \mathscr{S}] = 0 \tag{4.1.13}$$

が成り立つと仮定し，$|n>$ を固有値 E_n のエネルギー固有ケットとしよう．すると

$$H(\mathscr{S}|n>) = \mathscr{S}H|n> = E_n(\mathscr{S}|n>) \tag{4.1.14}$$

であるので，$\mathscr{S}|n>$ もまた同じエネルギーのエネルギー固有ケットである．いま $|n>$ と $\mathscr{S}|n>$ が異なる状態を表わすとしよう．このとき同じエネルギーを持つ二つの状態が存在する．すなわちこの二つの状態は縮退している．しばしば $\mathscr{S}$ は連続パラメータ，例えば λ で特徴づけられるが，このような場合 $\mathscr{S}(\lambda)|n>$ の形のすべての状態は同じエネルギーを持つ．

ここで特に回転を考えよう．ハミルトニアンが回転に関して不変であるとすると

$$[\mathscr{D}(R), H] = 0 \tag{4.1.15}$$

であり，必然的に

$$[\boldsymbol{J}, H] = 0, \quad [\boldsymbol{J}^2, H] = 0 \tag{4.1.16}$$

が成り立つ．このとき H，$\boldsymbol{J}^2$ と J_z の同時固有ケットを作り，$|n; j, m>$ と記すことができる．いま述べた議論によれば

$$\mathscr{D}(R)|n; j, m> \tag{4.1.17}$$

の形のすべての状態は，同じエネルギーを持つ．ところで第 3 章で見たように，異なる m の値は回転によって混じり合う．一般に $\mathcal{D}(R)|n;j,m>$ は $2j+1$ 個の独立した状態の一次結合であって，具体的に

$$\mathcal{D}(R)\,|n;j,m> = \sum_{m'}|n;j,m'>\mathcal{D}^{(j)}_{m'm}(R) \qquad (4.1.18)$$

と書ける．ここで回転演算子 $\mathcal{D}(R)$ を特徴づける連続パラメータを変えると，$|n;j,m'>$ の 1 次結合として異なったものが得られる．任意の $\mathcal{D}(R)$ に対し $\mathcal{D}(R)|n;j,m>$ の形のすべての状態が同じエネルギーを持つとすると，異なる m の $|n;j,m>$ のそれぞれは必ず同じエネルギーを持たなければならない．したがって縮退は（$2j+1$）重であり，m の取ることのできる値の数と一致する．このことは，$J_\pm$（H と交換する）を $|n;j,m>$ に次々とかけて得られるすべての状態が，同じエネルギーを持つことからも明らかである．

一つの応用として，ポテンシャルが $V(r)+V_{LS}(r)\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S}$ と書かれる原子内電子を考えよう．距離 r も $\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S}$ も共に回転不変であるから，それぞれの原子レベルに対して（$2j+1$）重の縮退が期待される．これに対し外部電場か外部磁場が，例えば z 方向にかけられているとしよう．回転対称性は明らかに破られている．この結果，（$2j+1$）重の縮退はもはや期待できず，m の値が異なる状態は，もはや同じエネルギーを持たない．このときどのような分裂が起こるかは，第 5 章で調べる．

4.2　非連続的対称性，パリティ，すなわち空間反転

今まで考えてきたのは連続的対称演算子であった．すなわち無限小対称操作をくり返し作用させて得られる操作であった．量子力学で有用な対称操作のすべてが，必ずしもこの形ではない．この章では連続的でなく非連続的と考えられる 3 種類の対称操作 —— パリティ，格子上の平行移動，および時間反転 —— を考察する．

はじめに考える操作は**パリティ**，すなわち空間反転である．パリティ操作を適用して座標系を変換すると，図4.1に示すように右手系（RH）が左

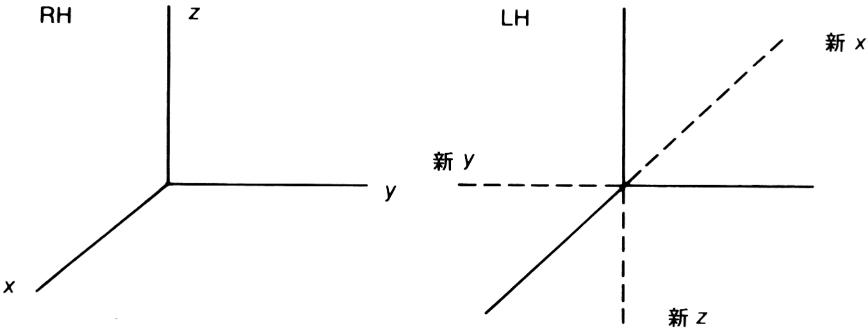


図 4.1. 右手系(RH)と左手系(LH).

手系（LH）に変わる．しかし本書では座標系に対してでなく状態ケットに対する変換を考えよう．与えられた状態ケット $|\alpha\rangle$ を空間反転させた状態を考える．この状態が**パリティ演算子**と呼ばれるユニタリー演算子 π をかけて

$$|\alpha\rangle \to \pi|\alpha\rangle \tag{4.2.1}$$

のように得られると仮定する．この空間反転させた状態に関して取った $\boldsymbol{x}$ の期待値では，符号が逆になることを要請しよう：

$$\langle\alpha|\pi^{\dagger}\boldsymbol{x}\pi|\alpha\rangle = -\langle\alpha|\boldsymbol{x}|\alpha\rangle. \tag{4.2.2}$$

これはまことにもっともな要請である．この式は

$$\pi^{\dagger}\boldsymbol{x}\pi = -\boldsymbol{x} \tag{4.2.3}$$

すなわち

$$\boldsymbol{x}\pi = -\pi\boldsymbol{x} \tag{4.2.4}$$

であれば満足される．ここで π がユニタリー的であることを用いた．言い換

えれば $\boldsymbol{x}$ と π は反交換しなければならない．

位置演算子の固有ケットは，パリティ演算の下でどのように変換するであろうか．我々は $e^{i\delta}$ を位相因子（δ は実数）として

$$\pi|\boldsymbol{x}'\rangle = e^{i\delta}|-\boldsymbol{x}'\rangle \tag{4.2.5}$$

であると主張する．この主張を証明するために

$$\boldsymbol{x}\pi|\boldsymbol{x}'\rangle = -\pi\boldsymbol{x}|\boldsymbol{x}'\rangle = (-\boldsymbol{x}')\pi|\boldsymbol{x}'\rangle \tag{4.2.6}$$

であることに注目しよう．この等式は $\pi|\boldsymbol{x}'\rangle$ が，$\boldsymbol{x}$ の固有ケットでその固有値が $-\boldsymbol{x}'$ であることを意味している．したがって $\pi|\boldsymbol{x}'\rangle$ は位相因子を別にして，位置固有ケット $|-\boldsymbol{x}'\rangle$ と等しくなければならない．

習慣上ふつう $e^{i\delta}=1$ に取る．これを（4.2.5）に代入すると $\pi^2|\boldsymbol{x}'\rangle = |\boldsymbol{x}'\rangle$ が得られる．したがって $\pi^2=1$ —— すなわち π を 2 回作用させると元と同じ状態に戻る．（4.2.5）式から容易に分かるように，π はユニタリー的であるばかりでなく，エルミート的である：

$$\pi^{-1} = \pi^{\dagger} = \pi \tag{4.2.7}$$

この固有値は $+1$ か -1 のみである．

運動量演算子に関してはどのようであろう．運動量 $\boldsymbol{p}$ は $m d\boldsymbol{x}/dt$ と同様であるから，$\boldsymbol{x}$ と同じように当然パリティが奇であると考えてよい．もっと満足のいく議論をするには，運動量演算子を平行移動の生成演算子と考える．図 4.2 から分かるように，平行移動したのち空間反転することと，空間反転したのち逆向きの平行移動をすることとは同値である．したがって

$$\pi\mathscr{T}(d\boldsymbol{x}') = \mathscr{T}(-d\boldsymbol{x}')\pi, \tag{4.2.8}$$

$$\pi\left(1-\frac{i\boldsymbol{p}\cdot d\boldsymbol{x}'}{\hbar}\right)\pi^{\dagger} = 1+\frac{i\boldsymbol{p}\cdot d\boldsymbol{x}'}{\hbar} \tag{4.2.9}$$

であり，これより

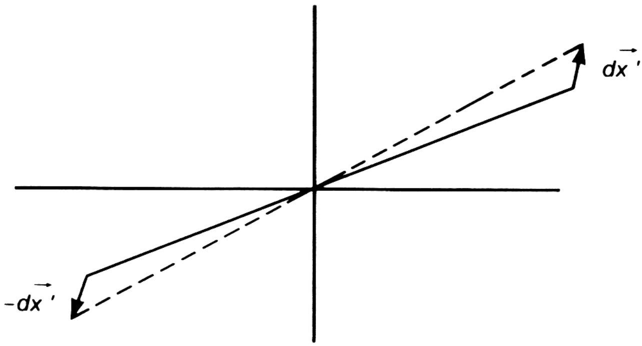


図 4.2. 平行移動したのちの空間反転とその順序が逆の操作.

$$\{\pi, \boldsymbol{p}\} = 0 \quad \text{すなわち} \quad \pi^\dagger \boldsymbol{p} \pi = -\boldsymbol{p} \tag{4.2.10}$$

が導かれる.

ここで空間反転に対する角運動量 $\boldsymbol{J}$ のふるまいが議論できる. まず軌道角運動量に対しては, 明らかに

$$[\pi, \boldsymbol{L}] = 0 \tag{4.2.11}$$

が成り立つ. 軌道角運動量は

$$\boldsymbol{L} = \boldsymbol{x} \times \boldsymbol{p} \tag{4.2.12}$$

であり, $\boldsymbol{x}$ も $\boldsymbol{p}$ も共にパリティが奇であるからである. しかしこの性質がスピンに対しても成り立つことを示すには, $\boldsymbol{J}$が回転の生成演算子であることを用いるのが一番よい. 3×3 の直交行列を用いると

$$R^{(\text{パリティ})} R^{(\text{回転})} = R^{(\text{回転})} R^{(\text{パリティ})} \tag{4.2.13}$$

が

$$R^{(\text{パリティ})} = \begin{pmatrix} -1 & & 0 \\ & -1 & \\ 0 & & -1 \end{pmatrix} \tag{4.2.14}$$

に対して成り立つ．すなわちパリティと回転の演算は交換する．量子力学ではユニタリー演算子 $\mathscr{D}(R)=1-i\boldsymbol{J}\cdot\hat{\boldsymbol{n}}\varepsilon/\hbar$ に対して，(4.2.13) と対応する関係式

$$\pi\mathscr{D}(R)=\mathscr{D}(R)\pi \tag{4.2.15}$$

が成り立つことを要請するのが自然である．この式から

$$[\pi,\boldsymbol{J}]=0 \quad \text{すなわち} \quad \pi^{\dagger}\boldsymbol{J}\pi=\boldsymbol{J} \tag{4.2.16}$$

が導ける．これは (4.2.11) と合せるとスピン演算子 ($\boldsymbol{J}=\boldsymbol{L}+\boldsymbol{S}$ から決められる) も $\boldsymbol{L}$ と同じように変換することを意味している．

回転に対して $\boldsymbol{x}$ と $\boldsymbol{J}$ は同じように変換する．これらは共にベクトルすなわち 1 階の球面テンソルである．しかし $\boldsymbol{J}$ のパリティが偶である [(4.2.16) を見よ] のに対して，$\boldsymbol{x}$ (または $\boldsymbol{p}$) のパリティは奇である [(4.2.3) および (4.2.10) を見よ]．パリティが奇のベクトルを**極性ベクトル**と呼び，パリティが偶のベクトルを**軸性ベクトル**または**擬ベクトル**と呼んでいる．

次に $\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{x}$ といった演算子を考えよう．回転に対してこれは，$\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{L}$ や $\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{p}$ のような通常のスカラーと同じ変換をする．しかし空間反転に対しては

$$\pi^{-1}\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{x}\pi=-\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{x} \tag{4.2.17}$$

であり，一方通常のスカラーに対しては

$$\pi^{-1}\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S}\pi=\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S} \tag{4.2.18}$$

などが成り立つ．演算子 $\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{x}$ は**擬スカラー**の例である．

波動関数のパリティ

次に波動関数のパリティの性質を調べよう．まず ψ を状態ケットが

$|\alpha>$ の，スピンのない粒子の波動関数とする：

$$\psi(\boldsymbol{x}') = < \boldsymbol{x}'|\alpha > . \tag{4.2.19}$$

状態ケット $\pi|\alpha>$ で表わされる空間反転した状態の波動関数は

$$< \boldsymbol{x}'|\pi|\alpha > = <-\boldsymbol{x}'|\alpha > = \psi(-\boldsymbol{x}') \tag{4.2.20}$$

である．

$|\alpha>$ がパリティの固有ケットであるとしよう．既に見たようにパリティの固有値は，±1 でなければならないから

$$\pi|\alpha > = \pm|\alpha > \tag{4.2.21}$$

である．対応する波動関数に着目すると

$$< \boldsymbol{x}'|\pi|\alpha > = \pm < \boldsymbol{x}'|\alpha> \tag{4.2.22}$$

であることが分かる．ところで

$$< \boldsymbol{x}'|\pi|\alpha > = < -\boldsymbol{x}'|\alpha > \tag{4.2.23}$$

でもあるので，対応する波動関数が

$$\psi(-\boldsymbol{x}') = \pm\,\psi(\boldsymbol{x}') \quad \begin{cases} \text{パリティ　偶} \\ \text{パリティ　奇} \end{cases} \tag{4.2.24}$$

のどちらを満足するかに応じて，状態 $|\alpha>$ のパリティは偶ないし奇である．

物理的に意味のある波動関数がすべて，(4.2.24) の意味で決まったパリティを持つわけではない．例えば運動量の固有ケットを考えよう．運動量演算子はパリティ演算子と反交換するから，運動量固有ケットはパリティ固有ケットであると期待できない．事実，運動量固有ケットの波動関数である平面波が (4.2.24) を満たさないことは容易に分かる．

軌道角運動量の固有ケットは，$\boldsymbol{L}$ と π とが交換するので［(4.2.11) を見よ］パリティの固有ケットであると期待される．$\boldsymbol{L}^2$ と L_z の固有ケットが

パリティに関してどのようにふるまうかを見るために，波動関数

$$< \boldsymbol{x}' | \alpha, l\, m > = R_\alpha(r)\, Y_l^m(\theta, \phi) \tag{4.2.25}$$

の空間反転に対する性質を調べよう．変換 $\boldsymbol{x}' \rightarrow -\boldsymbol{x}'$ を極座標で表わすと

$$\begin{aligned} & r \rightarrow r \\ & \theta \rightarrow \pi - \theta \quad (\cos\theta \rightarrow -\cos\theta) \\ & \phi \rightarrow \phi + \pi \quad (e^{im\phi} \rightarrow (-1)^m e^{im\phi}) \end{aligned} \tag{4.2.26}$$

である．m が正のときの波動関数の具体的な形

$$Y_l^m = (-1)^m \sqrt{\frac{(2l+1)(l-m)!}{4\pi(l+m)!}}\, P_l^m(\cos\theta) e^{im\phi} \tag{4.2.27}$$

と（3.6.38）を用い

$$P_l^{|m|}(\cos\theta) = \frac{(-1)^{m+l}(l+|m|)!}{2^l l! \quad (l-|m|)!} \sin^{-|m|}\theta \left(\frac{d}{d(\cos\theta)}\right)^{l-|m|} \sin^{2l}\theta \tag{4.2.28}$$

を考慮すると，θ と ϕ が（4.2.26）のように変化するとき

$$Y_l^m \rightarrow (-1)^l Y_l^m \tag{4.2.29}$$

となることが容易に示せる．したがって

$$\pi | \alpha, l\, m > = (-1)^l | \alpha, l\, m > \tag{4.2.30}$$

であると結論できる．Y_l^m を調べることは実際に必要なことでない．同じ結論をもっと簡単に導くには，$m=0$ の場合を調べ，π と$(L_\pm)^r$ （$r = 0, 1, \cdots\cdots\ l$）が交換することにより，$L_\pm{}^r | l, m=0 >$ が同じパリティを持つことに着目すればよい．

ここでエネルギー固有状態のパリティの性質を見よう．非常に重要な定理を述べることから始める．

定理 $[H, \pi] = 0$ (4.2.31)

とし，$|n>$ を固有値 E_n を持つ H の縮退していない固有ケットと仮定する：

$$H|n> = E_n|n>. \tag{4.2.32}$$

このとき $|n>$ はパリティの固有ケットでもある．

証明 この定理の証明にあたり，まず

$$\frac{1}{2}(1 \pm \pi)|n> \tag{4.2.33}$$

がパリティの固有ケットで固有値が ± 1 であることに注目しよう（単に $\pi^2 = 1$ を用いよ）．一方これは固有値 E_n を持つエネルギー固有ケットでもある．さらに $|n>$ と（4.2.33）は同じ状態を表わさなくてはならない．そうでないと同じエネルギーの二つの状態があることになり，縮退がないとした初めの条件に反する．したがって比例定数を別にして $|n>$ は（4.2.33）と等しく，パリティが ± 1 の固有ケットでなければならない． □

調和振動子を例にとろう．基底状態 $|0>$ は，波動関数がガウス型で $\boldsymbol{x}' \to -\boldsymbol{x}'$ に対して偶関数だから，パリティが偶である．第1励起状態

$$|1> = a^\dagger|0> \tag{4.2.34}$$

は，$a^\dagger$ がパリティが共に奇である x と p に関して1次なので［(2.3.2) を見よ］，奇のパリティを持たなければならない．一般に調和振動子の第 n 励起状態のパリティは $(-1)^n$ で与えられる．

この定理で縮退がないという仮定が本質的であることを注意しよう．例えば非相対論的量子力学で水素原子を考察する．よく知られているように，エネルギー固有値は主量子数 n にのみ依存している（例えば $2p$ 状態と $2s$ 状態は縮退している）．クーロンポテンシャルは明らかに空間反転に対して不変

であるが，エネルギー固有ケット

$$c_p|2p> + c_s|2s> \tag{4.2.35}$$

は明らかにパリティ固有ケットでない.

もう一つの例として運動量固有ケットを考えよう．運動量はパリティと反交換するから，自由粒子のハミルトニアンが空間反転に対して不変であっても，運動量固有ケットは（明らかにエネルギー固有ケットであっても）パリティ固有ケットではない．これは我々の定理に反しない．いま $|\boldsymbol{p}'>$ と $|-\boldsymbol{p}'>$ とは同じエネルギーを持ち，縮退があるからである．実際，線形結合 $(1/\sqrt{2})(|\boldsymbol{p}'>\pm|-\boldsymbol{p}'>)$ を作り固有値 ± 1 のパリティ固有ケットとすることは容易である．波動関数を用いて表わせば，$\exp(i\boldsymbol{p}'\cdot\boldsymbol{x}'/\hbar)$ は決まったパリティを持たないが，$\cos(\boldsymbol{p}'\cdot\boldsymbol{x}'/\hbar)$ や $\sin(\boldsymbol{p}'\cdot\boldsymbol{x}'/\hbar)$ は決まったパリティをもつ.

対称な二つの井戸型ポテンシャル

初等的ではあるが教訓的な例として，図 4.3 のような対称な二つの井

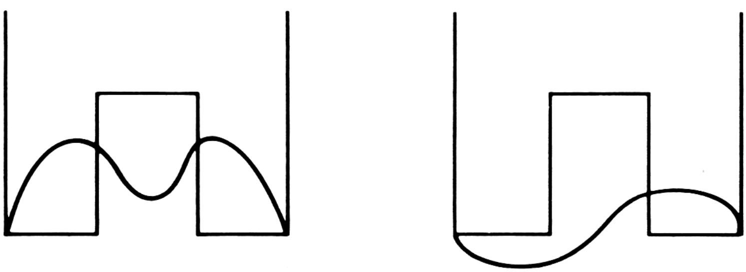


図 4.3. 対称な二つの井戸．下から二つのエネルギー状態 |S>（対称的）と |A>（反対称的）を示す.

戸型ポテンシャルを考える．ハミルトニアンは明らかに空間反転に対して不変であり，下から二つのエネルギー状態は図 4.3 に示されるようになる．これは

古典的に許される領域ではサインやコサインを用い，古典的に許されない領域では sinh や cosh を用いて，具体的に解を求めると分かる．ポテンシャルが不連続のところで二つの領域の解を合わせる．こうして得られた解は**対称状態** $|S>$ および**反対称状態** $|A>$ である．これらはもちろん H と π の同時固有ケットである．計算によると

$$E_A > E_S \tag{4.2.36}$$

が示せるが，これは図 4.3 からも，反対称状態の波動関数がより大きな曲率を持つことに着目すると推測できる．このエネルギー差は中央のポテンシャル障壁が高いと非常にわずかである．この点に関しては後に議論する．

次に $|S>$ と $|A>$ から

$$|R> = \frac{1}{\sqrt{2}}(|S> + |A>) \tag{4.2.37a}$$

および

$$|L> = \frac{1}{\sqrt{2}}(|S> - |A>) \tag{4.2.37b}$$

を作ることができる．波動関数（4.2.37a）および（4.2.37b）はそれぞれ，右側左側に大部分集中している．これらは明らかにパリティの固有状態でない．事実，空間反転により $|R>$ と $|L>$ は入れかわる．これらはまたエネルギーの固有状態でもないことに注目しよう．実際にこれらは**非定常状態**の典型的な例である．正確に述べるために，系が $t=0$ で $|R>$ により表わされていると仮定しよう．時間がたつと

$$\begin{aligned}|R, t_0=0\,;t> &= \frac{1}{\sqrt{2}}(e^{-iE_St/\hbar}|S> + e^{-iE_At/\hbar}|A>)\\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}e^{-iE_St/\hbar}(|S> + e^{-i(E_A-E_S)t/\hbar}|A>)\end{aligned} \tag{4.2.38}$$

となる．時刻 $t = T/2 \equiv 2\pi\hbar/2(E_A - E_S)$ で，系は純粋な $|L>$ 状態に見い出され，時刻 $t = T$ で純粋な $|R>$ 状態に戻る．このように一般に系は $|R>$ と $|L>$ の間を角振動数

$$\omega = \frac{E_A - E_S}{\hbar} \tag{4.2.39}$$

で振動する．

この振動的ふるまいは，量子力学のトンネル効果の観点からも考察できる．はじめ右側にいた粒子は古典的には禁止されている領域（中央の障壁）を通って左側にトンネルすることができ，また右側へ戻りこれを続ける．だがここで，中央の障壁を無限に高くしよう．図 4.4 を見よ．すると状態 $|S>$ と

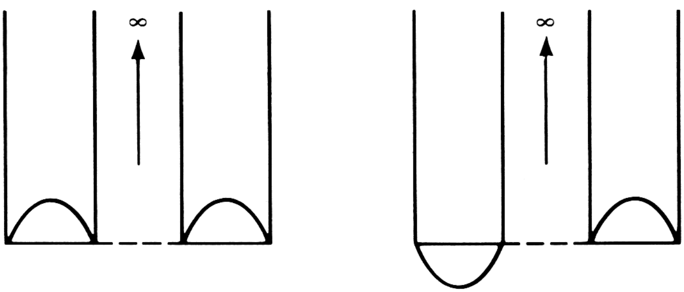


図 4.4. 中央の障壁が無限に高い対称な二つの井戸.

$|A>$ は縮退するので，(4.2.37a) と (4.2.37b) はパリティ固有ケットではないにも拘らず，エネルギー固有ケットになる．系が一度 $|R>$ に見い出されると，永久にその状態をとり続ける（$|S>$ と $|A>$ の間の振動周期は無限大である）．中央の障壁は無限に高いので，トンネルする可能性はない．つまり縮退があるとき，物理的に実現できるエネルギー固有状態は，パリティ固有ケットである必要がない．ハミルトニアンそれ自身が空間反転に対して実際，対称的であるにしても，非対称な基底状態が存在する．すなわち縮退があると

きは，H の対称性を反映してエネルギー固有状態が $|S>$ と $|A>$ になる必然性はない．

これは対称性の破れと縮退の関係を示す非常に簡単な例である．自然界にはこれと類似した事柄が実に沢山ある．強磁性体を考えよう．鉄原子に対するもともとのハミルトニアンは回転対称であるが，磁石には明らかに空間的に決まった方向がある．スピンがすべて，ある決まった（しかし任意の）方向を向いているので，無限に多くの基底状態は回転不変でない．

対称な二つの井戸型ポテンシャルが，現実に重要であることを説明する教科書的な例は，図 4.5 に示すアンモニア分子である．3個の H 原子が正

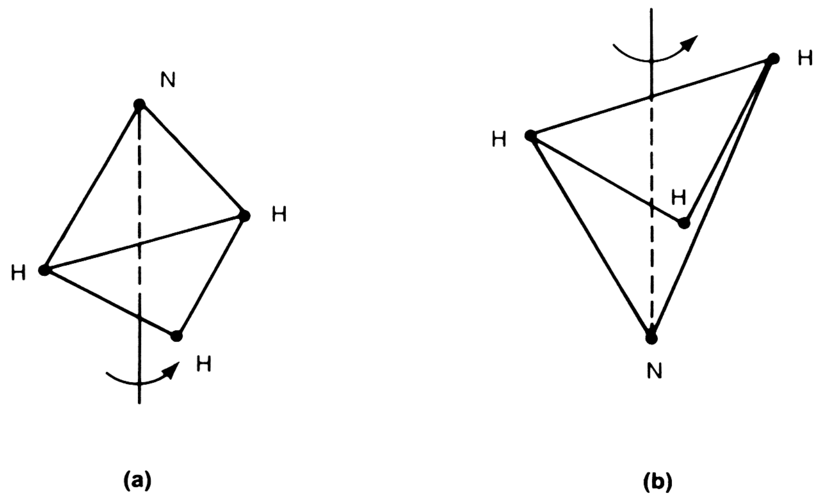


図 4.5. アンモニア分子 NH_3．3個の H 原子は正三角形の頂点にある．

三角形の各頂点にあるとする．N 原子は三角形の上側にあっても下側にあってもよい．上下の方向は，図 4.5 に示すように分子が軸のまわりを回っているので定義できる．N 原子のとる上下の位置は，二つの井戸型ポテンシャルの R と L に類似している．このパリティとエネルギーの固有状態は，図 4.5a と図

4.5b の，(4.2.37a) と (4.2.37b) の意味での重ね合せである．この二つのエネルギーとパリティの同時固有状態のエネルギー差は，24,000 MHz の振動数に対応し，波長にすれば約 1 cm でマイクロ波領域にある．実際，NH_3 はメーザー物理学において基本的に重要である．

砂糖やアミノ酸のような天然有機分子で，R 型（または L 型）だけがあるものがある．特定の左右像を持つこうした分子は，**光学異性体**と呼ばれる．多くの場合，振動周期は実際上無限に長く —— 10^4 から10^6 年であり —— R 型分子は現実の問題として常に右手型である．こうした有機分子を研究室で合成しようとすると，面白いことに R と L が等しく混ざったものができる．なぜ一つのタイプが優性になるのかは，自然の最大の神秘である．それはかたつむりの渦巻状の殻や，人間の心臓が左側にあることと同じように，発生学的な偶然であろうか．

パリティ選択則

$|\alpha>$ と $|\beta>$ がパリティ固有状態であるとする：

$$\pi|\alpha> = \varepsilon_\alpha|\alpha>, \tag{4.2.40a}$$

$$\pi|\beta> = \varepsilon_\beta|\beta>. \tag{4.2.40b}$$

ここで ε_α と ε_β はパリティ固有値 (± 1) である．すると $\varepsilon_\alpha = -\varepsilon_\beta$ でない限り

$$<\beta|\boldsymbol{x}|\alpha> = 0 \tag{4.2.41}$$

となることが示せる．いいかえればパリティが奇の演算子 $\boldsymbol{x}$ は，異なるパリティの状態間を結ぶ．この証明には次式に着目する：

$$<\beta|\boldsymbol{x}|\alpha> = <\beta|\pi^{-1}\pi\boldsymbol{x}\pi^{-1}\pi|\alpha> = \varepsilon_\alpha\varepsilon_\beta(-<\beta|\boldsymbol{x}|\alpha>). \tag{4.2.42}$$

ゼロでない有限な $<\beta|\boldsymbol{x}|\alpha>$ に対してこの等式が成り立つには，ε_α と ε_β が

異符号でなければならない．おそらく読者は，ψ_β と ψ_α のパリティが等しいとき

$$\int \psi_\beta{}^* \boldsymbol{x} \psi_\alpha d\tau = 0 \qquad (4.2.43)$$

となることから，(4.2.41) を導く論法にはなじみがあるであろう．ウィグナーの示したこの選択則は，原子状態間の放射遷移を議論する際に重要である．のちに詳述するが，放射遷移は，多重極展開を用いると分かるように，異なるパリティの状態間で起こる．この規則は量子力学の誕生前からスペクトル線の解析により，**ラポルテの規則**として現象論的に知られていた．ラポルテの規則がパリティ選択則の結果であることを示したのは，ウィグナーである．

ハミルトニアン H がパリティに対して不変であると，縮退のないエネルギー固有状態は［(4.2.43) の当然の結果として］永久電気双極子モーメントを持てない：

$$\langle n | \boldsymbol{x} | n \rangle = 0. \qquad (4.2.44)$$

非縮退の仮定により，エネルギー固有状態はパリティ固有状態でもあるので［(4.2.32) と (4.2.33) を見よ]，これは (4.2.43) から導かれる自明な結果である．一方，縮退のある状態が電気双極子モーメントを持つことには，何の問題もない．第5章で1次のシュタルク効果を議論する際，この例を見るであろう．

我々の考察を一般化することができる：パリティが奇の演算子，$\boldsymbol{p}$ や $\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{x}$ は，異なるパリティの状態間のみでゼロでない行列要素を持つ．これに対しパリティが偶の演算子は，同じパリティの状態を結ぶ．

パリティ非保存

素粒子のいわゆる弱い相互作用のハミルトニアンは，パリティに対して不変でない．崩壊過程では終状態に異なるパリティ状態の重ね合せが現われ

てもよい．崩壊生成粒子の角度分布のような観測量が，$< \boldsymbol{S} > \cdot \boldsymbol{p}$ といった擬スカラーに依存することもありうる．1956年にリーとヤンがパリティは弱い相互作用で保存していないと推論し，パリティ保存則の有効性を試す決定的な実験を提唱するまで，驚くべきことにパリティの保存は神聖な原理として信じられていた．続いて行なわれた実験は，観測された効果が $<\boldsymbol{S}>$ と $\boldsymbol{p}$ の相関というような擬スカラー量に依存することを実際に示した．弱い相互作用でパリティが保存していないので，以前“純粋”と信じられていた核や原子状態も，実はパリティが混合した状態である．このような微妙な効果も，実験的に見い出されている．

4.3　非連続的対称操作としての格子上の平行移動

ここで前節とは異なる非連続的対称操作を考察しよう．それは格子上の平行移動である．この問題は固体物理学に応用されて，極めて重要な結果を導く．

図 4.6 に示すような 1 次元の周期ポテンシャル $V(x \pm a) = V(x)$ を考える．実際に，規則的に配置された正イオンの鎖に沿った電子の運動を考えてもよい．ハミルトニアンは一般に，l を任意とした平行移動 $\tau(l)$ に対して不変ではない．ここで $\tau(l)$ には

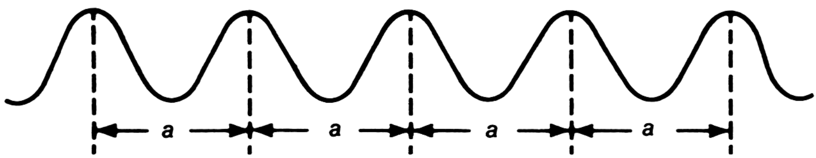
$$\tau^{\dagger}(l) x \tau(l) = x + l, \quad \tau(l)|x'> = |x' + l> \tag{4.3.1}$$

とする性質がある（1.6節参照）．しかし l が 格子間隔 a と一致するときは

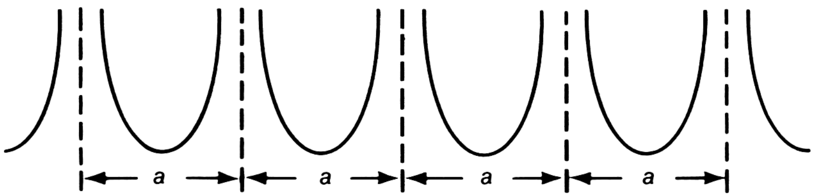
$$\tau(a)^{\dagger} V(x) \tau(a) = V(x+a) = V(x) \tag{4.3.2}$$

が成り立つ．ハミルトニアン H 中の運動エネルギーの部分は，任意の変位の平行移動に対して不変であるので，全ハミルトニアンは

$$\tau^{\dagger}(a) H \tau(a) = H \tag{4.3.3}$$



(a)



(b)

図 4.6. (a) 周期 a の1次元の周期的ポテンシャル. (b) 隣り合う二つの格子点間の障壁の高さが無限大になったときの周期的ポテンシャル.

を満足する. $\tau(a)$ はユニタリーであるから, (4.3.3) より

$$[H, \tau(a)] = 0 \tag{4.3.4}$$

が成り立ち, ハミルトニアンと $\tau(a)$ は同時に対角化できる. ただし $\tau(a)$ はユニタリーではあるがエルミートでないので, その固有値は絶対値1の複素数であると期待される.

$\tau(a)$ の固有ケットと固有値を決め, その物理的意味を検討する前に, 周期ポテンシャルの特別な場合を見ておくと役に立つ. それは図4.6b のように, 隣り合う二つの格子点間の障壁の高さを無限大とした場合である. 図

4.6b のポテンシャルに対して，基底状態はどのようであろうか．粒子が格子点の一つに完全に局在している状態は，明らかに基底状態の候補になる．話を明確にするために，粒子は n 番目の格子に局在していると仮定し，対応するケットを $|n>$ と記そう．これはエネルギー固有値 E_0 を持つエネルギー固有ケットである．すなわち $H|n> = E_0|n>$ である．その波動関数 $<x'|n>$ は，n 番目の格子でのみ有限である．しかし，他のある格子点に局在している同じような状態も，同じエネルギー E_0 を持つことに注意しよう．したがって実際は可附番無限個の基底状態 $|n>$ がある．ここで n は $-\infty$ から $+\infty$ の値をとる．

さて明らかに $|n>$ は格子上の平行移動演算子の固有ケットでない．なぜならば格子上の平行移動の演算子をかけると，$|n+1>$ の状態が得られる：

$$\tau(a)|n> = |n+1>. \tag{4.3.5}$$

したがって $\tau(a)$ が H と交換するという事実にも拘らず，$|n>$ —— H の固有ケット —— は $\tau(a)$の固有ケットでない．無限に重なった縮退があるので，これは対称性に関する以前述べた定理と整合している．このような縮退があるとき，世界のもつ対称性は必ずしもエネルギー固有ケットの対称性にならない．そこで問題は，H と $\tau(a)$ の同時固有ケットを見い出すことである．

ここで対称な二つのポテンシャルの井戸の問題を前節でどのように扱ったか，振り返ってみよう．今の問題と似かよったところがある．注意したように，$|R>$ も $|L>$ も π の固有ケットでないにも拘らず，$|R>$ と $|L>$ の対称的および反対称的結合を作り，容易にパリティの固有ケットとすることができた．いまの場合も類似している．ここで線形結合

$$|\theta> \equiv \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{in\theta}|n> \tag{4.3.6}$$

を作ろう．ここで θ は $-\pi \leq \theta \leq \pi$ の実数である．この $|\theta>$ が H と $\tau(a)$ の同時固有ケットであることを述べよう．これが H の固有ケットであること

は，$|n>$ が n に依存しない固有値 E_0 を持ったエネルギー固有ケットであることから明らかである．これが格子上の平行移動演算子の固有ケットでもあることを示すために，$\tau(a)$ を次のように作用させる：

$$\tau(a)|\theta> = \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{in\theta}|n+1> = \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{i(n-1)\theta}|n> = e^{-i\theta}|\theta>. \tag{4.3.7}$$

H と $\tau(a)$ のこの同時固有ケットは，連続パラメータ θ によって指定されることに注目しよう．一方エネルギー固有値 E_0 は θ に依存していない．

ここで図 4.6a に描いた，もっと現実的なポテンシャルの場合に戻ろう．隣り合う二つの格子点間の障壁は，無限に高くない．以前と同じように $\tau(a)|n> = |n+1>$ の性質を持つ局在ケット $|n>$ を作ることができる．しかし今度は，量子力学的トンネル効果により隣りの格子点に粒子が滲み出ていくことが可能と考えられる．いい換えれば波動関数 $<x'|n>$ は，n 番目の格子点以外の格子点に延びている尾を持っている．$\{|n>\}$ を基底とした H の対角要素は，平行移動不変性によってすべて等しく

$$< n|H|n> = E_0 \tag{4.3.8}$$

であり，以前と同じように n に依存しない．しかし滲み出しがあるので，H は $\{|n>\}$ の基底で完全に対角的ではないであろう．そこで隣り合う格子点間の障壁が高い（といって無限に高くはない）と仮定しよう．すると遠く離れた格子点間の H の行列要素は，完全に無視できると考えられる．非対角要素で重要なものは，最近隣接格子を結ぶものだけであると仮定しよう．すなわち

$$< n'|H|n> \neq 0 \tag{4.3.9}$$
$$n' = n \quad \text{または} \quad n' = n \pm 1 \text{のときのみ}$$

とする．固体物理でこの仮定は**強く束縛された近似**と呼ばれている．いま Δ を

$$< n \pm 1|H|n> = -\Delta \tag{4.3.10}$$

で定義しよう．明らかに Δ もまた，ハミルトニアンの平行移動不変性の結果，n に依らない．$|n>$ と $|n'>$ が $n \neq n'$ のときに直交するとすれば

$$H|n> = E_0|n> - \Delta|n+1> - \Delta|n-1> \tag{4.3.11}$$

が得られる．もはや $|n>$ はエネルギー固有ケットでないことに注意しよう．

図 4.6b のポテンシャルに対して行なったように，線形結合

$$|\theta> = \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{in\theta}|n> \tag{4.3.12}$$

を作ろう．(4.3.7) 式中の各等式がいまも成り立つので，明らかに $|\theta>$ は平行移動の演算子 $\tau(a)$ の固有ケットである．では $|\theta>$ はエネルギーの固有ケットであろうか，という疑問が自然に起こる．この問に答えるために，H をかけよう：

$$\begin{aligned} H\sum e^{in\theta}|n> &= E_0\sum e^{in\theta}|n> - \Delta\sum e^{in\theta}|n+1> \\ &\quad - \Delta\sum e^{in\theta}|n-1> \\ &= E_0\sum e^{in\theta}|n> - \Delta\sum(e^{in\theta - i\theta} + e^{in\theta + i\theta})|n> \\ &= (E_0 - 2\Delta\cos\theta)\sum e^{in\theta}|n>. \end{aligned} \tag{4.3.13}$$

この場合と以前の場合との著しい相違は，エネルギー固有値がいま，連続した実数パラメータ θ に依ることである．Δ が有限になると縮退が解け，$E_0-2\Delta$ と $E_0+2\Delta$ の間にエネルギー固有値の連続的分布ができる．図 4.7 を見よう．この図には，Δ がゼロから増大するにつれ，エネルギー準位が連続的エネルギーバンドを作り始める様子が示してある．

パラメータ θ の物理的意味を知るために，波動関数 $<x'|\theta>$ を調べよう．格子上で平行移動した状態 $\tau(a)|\theta>$ の波動関数として，$\tau(a)$ を $<x'|$ に作用させて

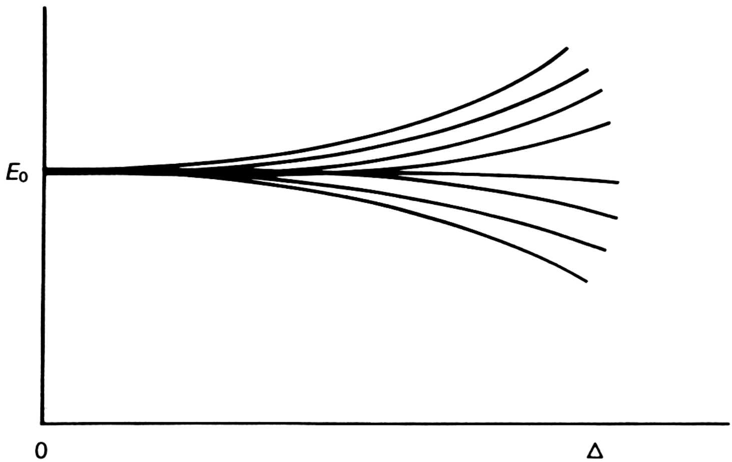


図 4.7. △ がゼロから増大するにつれて連続的バンドを作るエネルギー準位.

$$< x'|\tau(a)|\theta > = < x' - a|\theta > \tag{4.3.14}$$

が得られる．一方，$\tau(a)$ を $|\theta>$ に作用させ（4.3.7）を用いることもできて

$$<x'|\tau(a)|\theta > = e^{-i\theta}< x'|\theta > \tag{4.3.15}$$

となるから

$$< x'-a|\theta > = < x'|\theta > e^{-i\theta} \tag{4.3.16}$$

が成り立つ．この方程式は，$\theta = ka$ とし $u_k(x')$ を周期 a の周期関数とすると

$$< x'|\theta > = e^{ikx'}u_k(x') \tag{4.3.17}$$

と置いて解くことができる．これを確かめるのは容易である．直接代入すれば

$$e^{ik(x'-a)}u_k(x'-a) = e^{ikx'}u_k(x')e^{-ika} \tag{4.3.18}$$

と書けるので分かる．こうして**ブロッホの定理**と呼ばれている重要な定理が得られる．すなわち，$\tau(a)$ の固有ケットである $|\theta>$ の波動関数は，平面波 $e^{ikx'}$ に周期 a の周期関数をかけた形に表わせる．ここで我々の用いたのは，$|\theta>$ が固有値 $e^{-i\theta}$ を持つ $\tau(a)$ の固有ケットであるという事実だけであったことに注目しよう［(4.3.7) を見よ］．特にこの定理は，強く束縛された近似 (4.3.9) が有効でないときも成り立つ．

以上のことから，(4.3.12) で与えた $|\theta>$ に対して先に得られた結果 (4.3.13) が解釈できる．我々は波動関数が，周期関数 $u_k(x')$ で変調された平面波であり，進行波ベクトル k で特徴づけられることを知っている［(4.3.17) を見よ］．θ が $-\pi$ から π まで変化するとき，波数ベクトル k は $-\pi/a$ から π/a まで変化する．エネルギー固有値 E は，いま k に次のように依存する：

$$E(k) = E_0 - 2\Delta \cos ka . \tag{4.3.19}$$

このエネルギー固有値の式は，強く束縛された近似が有効な限りポテンシャルの詳細な形に依らないことに注意しよう．また，ブロッホの波動関数 (4.3.17) の波数ベクトル k には，$|k| = \pi/a$ で与えられる限界があることにも注目しよう．等式 (4.3.19) は，図 4.8 に描かれているような分散曲線を定義している．トンネル効果の結果，可附番無限の縮退は完全に解け，とりうるエネルギー値は $E_0 - 2\Delta$ と $E_0 + 2\Delta$ の間に**ブリルアン帯**と呼ばれる波数空間の領域に対して，連続的バンドを作る．

今まで考えていたのは，周期ポテンシャル中を運動するただ 1 個の粒子であった．もっと現実的な場合では，こうしたポテンシャル中を運動する数多くの電子を扱わなければならない．実際に電子は，第 6 章で系統的に議論するように，パウリの排他原理に従いバンドを満たしていく．こうして金属，半導体などの主な定性的特徴は，平行移動不変性と排他原理の結果として理解できる．

読者は4.2節で扱った対称な二つの井戸の問題と，この節の周期的ポ

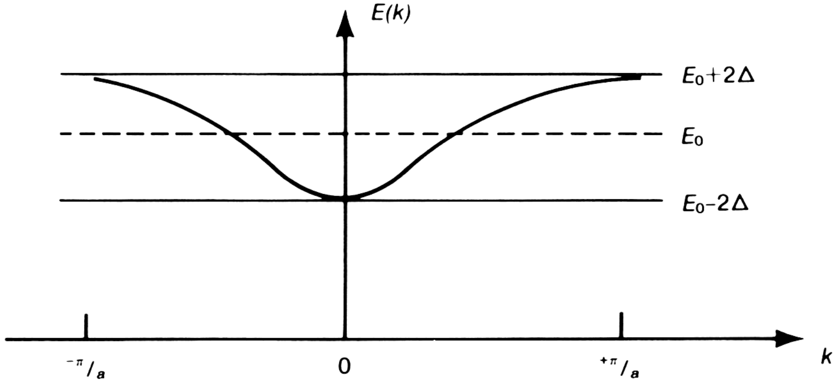


図 4.8.　ブリルアン帯 $|k|\leq\pi/a$ 内の k に対する $E(k)$ を表わす分散曲線.

テンシャルとの類似性に気付いたことであろう．図 4.3 と図 4.6 とを比較すると，両者は複数個の井戸があるポテンシャルの両極端（2個対無限個）と見なすことができる．

4.4　時間反転の非連続的対称性

この節では**時間反転**と呼ばれるもう一つの非連続的対称演算子を学ぶ．時間反転という用語は空想科学小説を思い出させる誤解し易い名前であることも原因となって，初心者にとってこれは難しい課題である．今からこの節で学ぶ事項は，運動の反転という言葉で表わすのが，より適切といえよう．しかしそれはE. ウィグナーによって使われた用語である．彼は1932年に書いた非常に基本的な論文の中で，時間反転を定式化した．

分かり易いように，まず古典力学を考えよう．ある力の場の中の粒子の軌跡があるとする：　図 4.9 を見よ．$t=0$ で粒子を止めその運動を逆にする：$\boldsymbol{p}|_{t=0}\rightarrow-\boldsymbol{p}|_{t=0}$．粒子は同じ軌道を逆向きに動いていく．もしこの軌道（a）の映画を（b）のように逆向きに回しても，このフィルムが正しい向きかどうかを見分けるのは困難であろう．

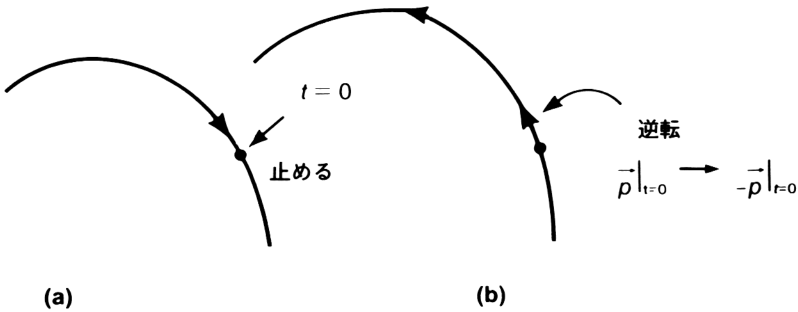


図 4.9. 古典的軌道で (a) $t=0$ で粒子を止め (b) 運動を逆転 $\boldsymbol{p}|_{t=0}\rightarrow -\boldsymbol{p}|_{t=0}$ させる.

もっと形式的に述べると，$\boldsymbol{x}(t)$ が

$$m\ddot{\boldsymbol{x}} = -\nabla V(\boldsymbol{x}) \qquad (4.4.1)$$

の一つの解であるとき，$\boldsymbol{x}(-t)$ も V から導かれる同じ力の場での可能な解である．もちろんここで散逸的な力がないことが重要である．机の上を滑っている積木は（まさつのために）減速し，ついには静止する．しかし机の上の積木がひとりでに動き出し，加速していくのを見たことがあるであろうか．

磁場があるときは，この差を見分けることができよう．磁場中でらせん運動をしている電子の軌跡を，映画に撮ったとしよう．図 4.10 を見よ．この映画が普通の向きに映写されているのか逆向きなのかは，電子の回転方向と磁極の NS のしるしを比較すれば分かるであろう．しかし微視的に見ると，磁場 $\boldsymbol{B}$ は電荷の運動である電流から作られている．$\boldsymbol{B}$ のもとである電流を逆転することができたなら，場面は全く対称的になる．そのときは図 4.10 で電子の回転も磁場も逆転されるから，絵の中の N と S のしるしが間違ってついていることに気付いたであろう．以上のすべてをもっと形式を整えて述べると，例えばマックスウェル方程式

$$\nabla\cdot\boldsymbol{E} = 4\pi\rho, \quad \nabla\times\boldsymbol{B}-\frac{1}{c}\frac{\partial\boldsymbol{E}}{\partial t} = 4\pi\frac{\boldsymbol{j}}{c}, \quad \nabla\times\boldsymbol{E} = -\frac{1}{c}\frac{\partial\boldsymbol{B}}{\partial t} \qquad (4.4.2)$$

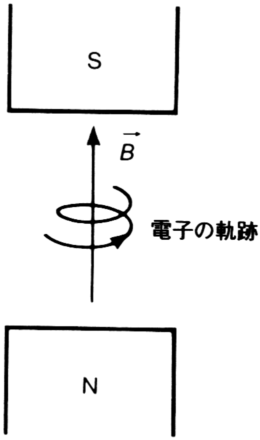


図 4.10.　磁石のＮ極Ｓ極間での電子の軌跡.

とローレンツ力の方程式 $\boldsymbol{F} = e\,[\boldsymbol{E} + (1/c)(\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{B})]$ は，$t \to -t$ とすると同時に

$$\boldsymbol{E} \to \boldsymbol{E},\quad \boldsymbol{B} \to -\boldsymbol{B},\quad \rho \to \rho,\quad \boldsymbol{j} \to -\boldsymbol{j},\quad \boldsymbol{v} \to -\boldsymbol{v} \qquad (4.4.3)$$

とすると不変であるということになる.

次に波動力学ではどうであろう．基礎方程式はシュレーディンガーの波動方程式で

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V\right)\psi \qquad (4.4.4)$$

である．$\psi(\boldsymbol{x}, t)$ を，この一つの解としよう．$\psi(\boldsymbol{x}, -t)$ は解でないことは，時間の 1 階微分があることから，すぐに確かめられる．しかし (4.4.4) の複素共役をとると確かめられるように，$\psi^*(\boldsymbol{x}, -t)$ は解である．この点をエネルギー固有状態に対して確認すること，すなわち

$$\psi(\boldsymbol{x}, t) = u_n(\boldsymbol{x})e^{-iE_nt/\hbar}, \quad \psi^*(\boldsymbol{x}, -t) = u_n^*(\boldsymbol{x})e^{-iE_nt/\hbar} \tag{4.4.5}$$

を（4.4.4）に代入して確かめることは教育的である．こうして，時間反転が複素共役と関連しているらしいとの推測ができる．時刻 $t=0$ で波動関数が

$$\psi = < \boldsymbol{x}|\alpha > \tag{4.4.6}$$

で与えられているとき，対応する時間反転した状態の波動関数は $< \boldsymbol{x}|\alpha >^*$ で与えられる．実際にこうなっていることを，スピンを持たない系の波動関数に対して，のちに示そう．例えば平面波の波動関数に対して，この点は簡単にチェックできる．この章末の問題 7 を見よ．

対称操作についての補説

時間反転演算子を系統的に議論するのに先立って，対称操作に関する一般的な注意を少し述べておくのがよいであろう．ある対称操作

$$|\alpha > \to |\tilde{\alpha} >, \quad |\beta > \to |\tilde{\beta} > \tag{4.4.7}$$

を考える．ここで内積 $< \beta|\alpha >$ が保存されること，すなわち

$$< \tilde{\beta}|\tilde{\alpha} > = < \beta|\alpha > \tag{4.4.8}$$

を要請するのが自然といえよう．実際に回転，平行移動およびパリティといった対称操作に対しては，その通りである．いま $|\alpha >$ が回転を受け，$|\beta >$ も同様に回転を受けると，$<\beta|\alpha >$ は変化しない．形式的にいうと，これは前節で考察した対称操作では対応する対称演算子がユニタリーであって

$$< \beta|\alpha > \to <\beta|U^\dagger U|\alpha > = < \beta|\alpha> \tag{4.4.9}$$

と書けることに由来する．

しかし時間反転を議論する際には，（4.4.8）の要請は厳し過ぎることが分かる．その代りに単に，もっと弱い要請

$$|<\tilde{\beta}|\tilde{\alpha}>| = |<\beta|\alpha>| \qquad (4.4.10)$$

を置く．要請（4.4.8）は明らかに（4.4.10）を満たす．しかし（4.4.10）を満たすのはそればかりでなく

$$<\tilde{\beta}|\tilde{\alpha}> = <\beta|\alpha>^* = <\alpha|\beta> \qquad (4.4.11)$$

としても同じである．この節では後者の可能性を追求しよう．シュレーディンガー方程式に基づく先程の議論から，時間反転が複素共役と関連することを推察しているからである．

定義　変換

$$|\alpha> \to |\tilde{\alpha}> = \theta|\alpha>, \quad |\beta> \to |\tilde{\beta}> = \theta|\beta> \qquad (4.4.12)$$

に対して

$$<\tilde{\beta}|\tilde{\alpha}> = <\beta|\alpha>^*, \qquad (4.4.13a)$$

$$\theta(c_1|\alpha> + c_2|\beta>) = c_1^*\theta|\alpha> + c_2^*\theta|\beta> \qquad (4.4.13b)$$

が成り立つとき，この変換を**反ユニタリー**であるという．このとき演算子 θ は反ユニタリー演算子であるという．関係式（4.4.13b）のみからは**反線形**演算子が定義される．

ここで反ユニタリー演算子が

$$\theta = UK \qquad (4.4.14)$$

と書けることを述べよう．U はユニタリー演算子であり，K はケットにかかる任意の係数（K の右側にあるもの）を複素共役にする**複素共役演算子**である．（4.4.13）を確かめる前に，K 演算子の性質を調べよう．複素数 c がかかったケットを考える．このとき

$$Kc|\alpha> = c^* K|\alpha> \tag{4.4.15}$$

である．ここでさらに，$|\alpha>$ が基底ケット $\{|a'>\}$ で展開されるとどうなるかを考えよう．K の作用により

$$\begin{aligned} &|\alpha> = \sum_{a'} |a'><a'|\alpha> \\ \xrightarrow{K}\ &|\tilde{\alpha}> = \sum_{a'} <a'|\alpha>^* K|a'> = \sum_{a'} <a'|\alpha>^* |a'> \end{aligned} \tag{4.4.16}$$

となる．基底ケットにかかる K は基底ケットを変化させないことに注目しよう．$|a'>$ の具体的な表現は

$$|a'> = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \tag{4.4.17}$$

であり，K によって変化することはない．読者は，例えばスピン 1/2 の系で S_y の固有ケットは，K がかかると変化するのでないかと疑問に思うかもしれない．答は次の通りである．基底ケットとして S_z の固有ケットを用いたならば，S_y の固有ケット（1.1.14）に K がかかると

$$K\left(\frac{1}{\sqrt{2}}|+> \pm \frac{i}{\sqrt{2}}|->\right) \to \frac{1}{\sqrt{2}}|+> \mp \frac{i}{\sqrt{2}}|-> \tag{4.4.18}$$

となるので，S_y の固有ケットを変えなければならない．一方，基底ケットとして S_y の固有ケットそのものを用いるときは，K の作用によって S_y の固有ケットは変化しない．このように K の効果は基底によって異なる．その結果，

(4.4.14) 式中の U の形も，用いる各々の表示（すなわち基底の選び方）に依存する．ゴットフリードが的確に述べているように“基底が変わったなら，U と K の働きも再編成しなければならない”のである[†]．

$\theta = UK$ と (4.4.13) に戻り，まず (4.4.13b) の性質を確かめよう．

$$\begin{aligned}\theta(c_1|\alpha> + c_2|\beta>) &= UK(c_1|\alpha> + c_2|\beta>)\\ &= c_1^* UK|\alpha> + c_2^* UK|\beta>\\ &= c_1^*\theta|\alpha> + c_2^*\theta|\beta> \qquad (4.4.19)\end{aligned}$$

であるから，(4.4.13b) は実際に成り立っている．(4.4.13a) をチェックするにあたって，ケットに作用する θ のみをいつも考える方が間違いが少ない．ブラがどのように変化するかは，対応するケットを見れば推測できる．特に，ブラに右側からかかる θ を考える必要はないし，$\theta^\dagger$ を定義する必要もない．まず次式

$$\begin{aligned}|\alpha> \xrightarrow{\theta} |\tilde{\alpha}> &= \sum_{a'} <a'|\alpha>^* UK|a'>\\ &= \sum_{a'} <a'|\alpha>^* U|a'> = \sum_{a'} <\alpha|a'> U|a'> \qquad (4.4.20)\end{aligned}$$

が成り立つ．次に $|\beta>$ に関しては

$$\begin{aligned}|\tilde{\beta}> &= \sum_{a'} <a'|\beta>^* U|a'>\\ &\xleftrightarrow{\text{DC}} <\tilde{\beta}| = \sum_{a'} <a'|\beta><a'|U^\dagger\end{aligned}$$

であるから

$$\begin{aligned}<\tilde{\beta}|\tilde{\alpha}> &= \sum_{a''}\sum_{a'} <a''|\beta><a''|U^\dagger U|a'><\alpha|a'>\\ &= \sum_{a'} <\alpha|a'><a'|\beta> = <\alpha|\beta>\end{aligned}$$

† 訳注：Gottfried 1966, p. 229.

$$= \langle \beta | \alpha \rangle^* \tag{4.4.21}$$

となり（4.4.13a）が確かめられる．

（4.4.10）式を満足するものの中で，物理的に考慮する必要があるのは，ただ二つの形の変換 —— ユニタリー形と反ユニタリー形 —— だけである．他の可能なものは，そのどちらかと簡単な位相の変更によって関連している．この証明は実際には非常に難しく，ここではこれ以上述べない（Gottfried 1966, pp.226-228を参照せよ）．

時間反転演算子

これで時間反転の形式論を提示する準備がととのった．時間反転演算子を Θ の記号で表わし，一般の反ユニタリー演算子 θ と区別しよう．変換

$$|\alpha\rangle \to \Theta|\alpha\rangle \tag{4.4.22}$$

を考えよう．$\Theta|\alpha\rangle$ は時間反転を受けた状態である．これを運動が反転された状態と呼ぶ方が，より適切であろう．$|\alpha\rangle$ が運動量固有状態 $|\boldsymbol{p}'\rangle$ であるとすると，$\Theta|\alpha\rangle$ は位相因子は別にして $|-\boldsymbol{p}'\rangle$ であると期待される．同じように，$\boldsymbol{J}$ は時間反転を受けて反転することが期待される．

ここで時間反転演算子の基本的性質を，時間反転させた状態の時間的発展を観察して導き出そう．時刻 $t=0$ でケット $|\alpha\rangle$ により表わされる物理系を考える．すると少し後の時刻 $t=\delta t$ で，系は

$$|\alpha, t_0=0\,; t=\delta t\rangle = \left(1-\frac{iH}{\hbar}\delta t\right)|\alpha\rangle \tag{4.4.23}$$

の状態に見い出される．ここで H は時間的発展を記述するハミルトニアンである．この等式の代りに，時刻 $t=0$ でまず Θ を作用させ，その後ハミルトニアン H の影響下で系を時間発展させよう．すると時刻 δt で

$$\left(1-iH\frac{\delta t}{\hbar}\right)\Theta|\alpha\rangle \tag{4.4.24a}$$

となる．もし運動が時間反転の下で対称的ならば，上の状態ケットは

$$\Theta|\alpha, t_0 = 0 ; t = -\delta t> \tag{4.4.24b}$$

と同じであることが期待される．すなわち，まず少し前の時刻 $t = -\delta t$ での状態ケットを考え，そこで $\boldsymbol{p}$ と $\boldsymbol{J}$ を反転する．図 4.11 を見よ．数式で表わすと

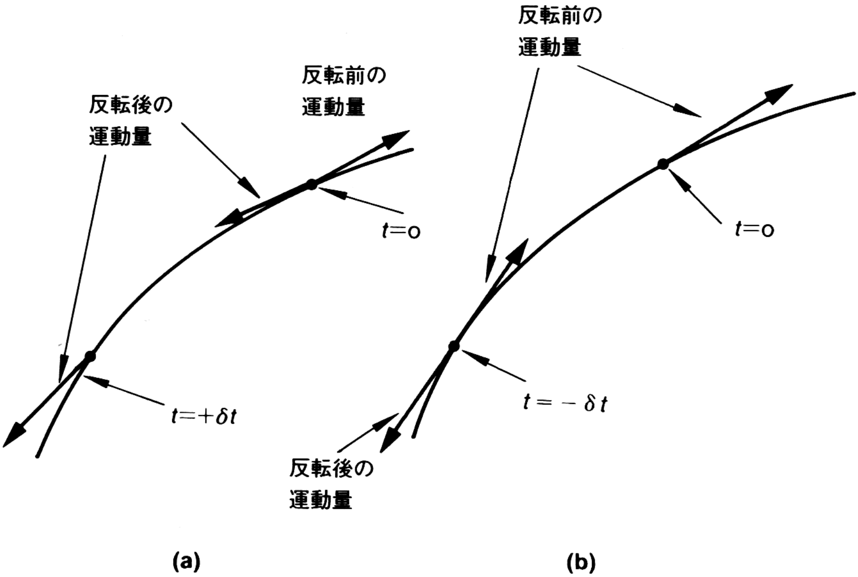


図 4.11.　時刻 $t=0$ と $t=\pm\delta t$ における時間反転の前後の運動量．

$$\left(1 - \frac{iH}{\hbar}\delta t\right)\Theta|\alpha> = \Theta\left(1 - \frac{iH}{\hbar}(-\delta t)\right)|\alpha> \tag{4.4.25}$$

と書ける．この関係式が任意のケットに対して正しいならば

$$-iH\Theta|> = \Theta iH|> \tag{4.4.26}$$

でなければならない．ここで空のケット $|>$ は，(4.4.26) が任意のケットに

対して成り立つことを強調している．

次に，時間反転の運動が意味を持つとき，Θ はユニタリーではありえないことを述べよう．仮に Θ がユニタリーであったとする．すると（4.4.26）式中で i を打ち消すことが許され，演算子の等式

$$-H\Theta=\Theta H \tag{4.4.27}$$

が得られるであろう．ここで固有値 E_n を持つエネルギー固有状態 $|n>$ を考える．対応する時間反転された状態は $\Theta|n>$ であり，（4.4.27）によって

$$H\Theta|n>=-\Theta H|n>=(-E_n)\Theta|n> \tag{4.4.28}$$

が成り立つことになる．この方程式は $\Theta|n>$ がハミルトニアンの固有ケットで，エネルギー固有値 $-E_n$ をもつことを述べている．しかしこれは，自由粒子という最も簡単な場合にさえも，不合理である．周知のように自由粒子のエネルギースペクトルは，0 から $+\infty$ までの半正値をとる．静止している粒子（運動量固有値がゼロの運動量固有状態）より低い状態はない．$-\infty$ から 0 に至るエネルギースペクトルは，全く考えられない．このことは自由粒子のハミルトニアンの構造を見ても分かる．我々は Θ によって $\boldsymbol{p}$ は符号を変えるが $\boldsymbol{p}^2$ は変えないことを期待する．しかし（4.4.27）によれば

$$\Theta^{-1}\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}\Theta=-\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} \tag{4.4.29}$$

となる．

以上の議論を通じて，時間反転が有用な対称性であるためには，（4.4.26）中で i を打ち消すことが許されないことが明確に示された．したがって Θ を反ユニタリーにとる方がよい．この場合（4.4.26）の右辺は，（4.4.13b）の反線形性によって

$$\Theta iH|\;>=-i\Theta H|> \tag{4.4.30}$$

となる．ここでやっと（4.4.26）式中の i を打ち消すことができ，（4.4.30）を使って

$$\Theta H = H\Theta \tag{4.4.31}$$

が導ける．（4.4.31）式は，時間反転に対するハミルトニアンの基本的な性質を表わしている．この式を使えば，前述の困難［(4.4.27) から（4.4.29）を見よ］は無く，物理的に意味のある結果が得られる．今後，Θ はいつも反ユニタリーにとることにする．

前にも述べたが，反ユニタリー演算子をブラに右から作用させるのは避けるのがよい．しかし

$$<\beta|\Theta|\alpha> \tag{4.4.32}$$

を用いることがある．これはいつも

$$(<\beta|)\cdot(\Theta|\alpha>) \tag{4.4.33}$$

のように解釈すべきであり，決して

$$(<\beta|\Theta)\cdot|\alpha> \tag{4.4.34}$$

としてはならない．実際，$<\beta|\Theta$ を定義する試みすらしない．この点はディラックのブラ・ケットによる記法が，少し混乱を引き起こすところである．この記法は結局，線形演算子を扱うために作られたものであって，反線形演算子のためではない．

以上のことに留意しながら，時間反転の下での一般の演算子の振舞いを議論しよう．演算子 Θ は依然としてケットに作用するという立場をとる：

$$|\tilde{\alpha}> = \Theta|\alpha>, \quad |\tilde{\beta}> = \Theta|\beta>. \tag{4.4.35}$$

時間反転の下で偶ないし奇の演算子 —— とくに観測量 —— を対象にしておくと便利なことが多い．重要な恒等式

$$<\beta|\otimes|\alpha> = <\tilde{\alpha}|\Theta\otimes^{\dagger}\Theta^{-1}|\tilde{\beta}> \tag{4.4.36}$$

から始めよう．ここで $\otimes$ は線形演算子とする．この恒等式は，Θ の反ユニタリー的性質のみから導ける．証明にあたり，まず

$$|\gamma> \equiv \otimes^{\dagger}|\beta> \tag{4.4.37}$$

を定義しよう．双対対応（dual correspondence）により

$$|\gamma> \overset{\text{DC}}{\longleftrightarrow} <\beta|\otimes = <\gamma| \tag{4.4.38}$$

が成り立つ．したがって

$$\begin{aligned} <\beta|\otimes|\alpha> &= <\gamma|\alpha> = <\tilde{\alpha}|\tilde{\gamma}> \\ &= <\tilde{\alpha}|\Theta\otimes^{\dagger}|\beta> \\ &= <\tilde{\alpha}|\Theta\otimes^{\dagger}\Theta^{-1}\Theta|\beta> \\ &= <\tilde{\alpha}|\Theta\otimes^{\dagger}\Theta^{-1}|\tilde{\beta}> \end{aligned} \tag{4.4.39}$$

となり恒等式（4.4.36）が証明できる．特にエルミート的な観測量 A に対しては

$$<\beta|A|\alpha> = <\tilde{\alpha}|\Theta A\Theta^{-1}|\tilde{\beta}> \tag{4.4.40}$$

が成り立つ．観測量が時間反転の下で偶であるか奇であるかは

$$\Theta A\Theta^{-1} = \pm A \tag{4.4.41}$$

の式で上の符号をとるか下の符号をとるかに従って定める．この等式と（4.4.40）とを共に用いると，時間反転した状態に関してとった A の行列要素に対し，位相が制限されることに注意しよう：

$$<\beta|A|\alpha> = \pm <\tilde{\beta}|A|\tilde{\alpha}>^{*}. \tag{4.4.42}$$

$|\beta>$ が $|\alpha>$ に等しいとき，つまり期待値を問題にするときは

$$< \alpha|A|\alpha > = \pm < \tilde{\alpha}|A|\tilde{\alpha} > \tag{4.4.43}$$

である．$<\tilde{\alpha}|A|\tilde{\alpha}>$ は，時間反転した状態に関してとった期待値である．

例として $\boldsymbol{p}$ の期待値に着目しよう．時間反転した状態に関してとった $\boldsymbol{p}$ の期待値は，逆符号になると期待するのは正当であろう．すなわち

$$< \alpha|\boldsymbol{p}|\alpha > = - < \tilde{\alpha}|\boldsymbol{p}|\tilde{\alpha} > \tag{4.4.44}$$

である．そこで $\boldsymbol{p}$ を奇の演算子，すなわち

$$\boldsymbol{\Theta p \Theta}^{-1} = - \boldsymbol{p} \tag{4.4.45}$$

にとる．これは

$$\boldsymbol{p\Theta}|\boldsymbol{p}' > = - \boldsymbol{\Theta p \Theta}^{-1}\boldsymbol{\Theta}|\boldsymbol{p}' > = (-\boldsymbol{p}')\boldsymbol{\Theta}|\boldsymbol{p}' > \tag{4.4.46}$$

を意味する．等式（4.4.46）は $\boldsymbol{\Theta}|\boldsymbol{p}' >$ が，固有値 $-\boldsymbol{p}'$ をもつ運動量固有ケットであるという，我々の以前の主張と一致する．$\boldsymbol{\Theta}|\boldsymbol{p}' >$ は，位相を適当に選ぶと，$|-\boldsymbol{p}' >$ そのものと同一視できる．同じようにして

$$\boldsymbol{\Theta x \Theta}^{-1} = \boldsymbol{x}, \quad \boldsymbol{\Theta}|\boldsymbol{x}' > = |\boldsymbol{x}' > \quad \text{（位相を別にして）} \tag{4.4.47}$$

が，（全く正当な）要請

$$< \alpha|\boldsymbol{x}|\alpha > = < \tilde{\alpha}|\boldsymbol{x}|\tilde{\alpha} > \tag{4.4.48}$$

から得られる．

ここで基本的交換関係

$$[x_i, p_j]| > = i\hbar\,\delta_{ij}| > \tag{4.4.49}$$

の不変性も確かめられる．空のケット $| >$ は任意のケットを表わす．(4.4.49) の両辺に $\boldsymbol{\Theta}$ をかけると

$$\boldsymbol{\Theta}[x_i, p_j]\boldsymbol{\Theta}^{-1}\boldsymbol{\Theta}| > = \boldsymbol{\Theta} i\hbar\,\delta_{ij}| > \tag{4.4.50}$$

と書けるが，$\boldsymbol{\Theta}$ を $i\hbar$ の右に動かすと上式から

$$[x_i, (-p_j)]\boldsymbol{\Theta}|> = -i\hbar\,\delta_{ij}\boldsymbol{\Theta}|> \qquad (4.4.51)$$

が導かれる．基本的な交換関係式 $[x_i, p_j] = i\hbar\,\delta_{ij}$ は，$\boldsymbol{\Theta}$ が実際に反ユニタリーであるお蔭で保存されることに注意しよう．これは $\boldsymbol{\Theta}$ を反ユニタリーにとるもう一つの理由として，あげられる．さもなければ（4.4.45）または（4.4.47）を放棄しなければならない！　同じように

$$[J_i, J_j] = i\hbar\,\varepsilon_{ijk}J_k \qquad (4.4.52)$$

を保存するためには，角運動量の演算子が時間反転に関して奇，すなわち

$$\boldsymbol{\Theta}\boldsymbol{J}\boldsymbol{\Theta}^{-1} = -\boldsymbol{J} \qquad (4.4.53)$$

でなければならない．スピンを持たない系では，$\boldsymbol{J}$ がちょうど $\boldsymbol{x}\times\boldsymbol{p}$ であるから，これは上の結果と一致している．この関係式を別の方法で導くことは，回転演算子と時間反転演算子が交換することに注意すればできる（i が余分につくことに注意せよ！）.

波動関数

ある与えられた時刻，例えば $t=0$ に，スピンを持たない1粒子系が，$|\alpha>$ で表わされる状態に見い出されたとしよう．その波動関数 $<\boldsymbol{x}'|\alpha>$ は，$|\alpha>$ の位置表示展開

$$|\alpha> = \int d^3x'|\boldsymbol{x}'><\boldsymbol{x}'|\alpha> \qquad (4.4.54)$$

の展開係数として現われる．時間反転の演算子を作用させると

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\Theta}|\alpha> &= \int d^3x'(\boldsymbol{\Theta}|\boldsymbol{x}'>)<\boldsymbol{x}'|\alpha>^* \\ &= \int d^3x'|\boldsymbol{x}'><\boldsymbol{x}'|\alpha>^* \end{aligned} \qquad (4.4.55)$$

となる．ここで $\Theta|\boldsymbol{x}'>$ が $|\boldsymbol{x}'>$ になるように位相を選んだ．こうして，以前シュレーディンガーの波動方程式から推量した規則

$$\psi(\boldsymbol{x}') \rightarrow \psi^*(\boldsymbol{x}') \qquad (4.4.56)$$

が再現される［(4.4.5) 式を見よ］．この波動関数の角度部分は，球面調和関数 Y_l^m で与えられる．普通用いられている位相を使うと

$$Y_l^m(\theta, \phi) \rightarrow Y_l^{m*}(\theta, \phi) = (-1)^m Y_l^{-m}(\theta, \phi) \qquad (4.4.57)$$

である．ところで $Y_l^m(\theta, \phi)$ は $|l, m>$ を表わす波動関数である［(3.6.23) を見よ］．したがって (4.4.56) から

$$\Theta|l, m> = (-1)^m|l, -m> \qquad (4.4.58)$$

が導ける．$R(r)Y_l^m(\theta, \phi)$ のように書ける (3.6.22) の形の波動関数に対して，確率流密度 (2.4.16) を調べると，$m>0$ に対して確率流は z-軸の正方向から見て反時計回りに流れていることが分かる．これに対応する時間反転した状態の波動関数では，m の符号が逆転しているので，確率流が反対方向に流れている．これらはすべてもっともな結果である．

時間反転不変性の自明でない帰結の一つとして，スピンを持たない粒子のエネルギー固有関数が実数であるという，重要な定理を述べよう．

定理　ハミルトニアンが時間反転に関して不変であり，エネルギー固有ケット $|n>$ は縮退していないとする．このとき対応するエネルギー固有関数は，実数（より一般には $\boldsymbol{x}$ に依存しない位相因子がかかった実関数）である．

証明　この証明にあたって，はじめに

$$H\Theta|n> = \Theta H|n> = E_n\Theta|n> \qquad (4.4.59)$$

であること，つまり $|n>$ と $\Theta|n>$ は同じエネルギーを持つことに注意しよう．縮退がないという仮定から，$|n>$ と $\Theta|n>$ は同じ状態を表わさなければならないことが結論できる．さもないと一つのエネルギー E_n に二つの異なる状態があることになり，明らかに矛盾する．ところで $|n>$ と $\Theta|n>$ の波動関数は，それぞれ $<\boldsymbol{x}'|n>$ と $<\boldsymbol{x}'|n>^*$ であることを思い出そう．この二つは事実上同一，すなわち

$$<\boldsymbol{x}'|n> = <\boldsymbol{x}'|n>^* \tag{4.4.60}$$

でなければならない．もっと厳密に述べれば，両者はたかだか $\boldsymbol{x}$ に依存しない位相因子だけしか異なっていない． □

したがって例えば縮退のない束縛状態があると，その波動関数は常に実数である．一方，$l \neq 0$，$m \neq 0$ の水素原子では，決まった (n, l, m) の量子数で特徴づけられるエネルギー固有関数は，Y_l^m が複素数なので，複素数である．$|n, l, m>$ と $|n, l, -m>$ が縮退しているので，これは定理に反しない．同じように，平面波の波動関数 $\exp(i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}/\hbar)$ は複素数であるが，これは $\exp(-i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}/\hbar)$ と縮退している．

スピンを持たない系では，例えば $t=0$ で時間反転した状態の波動関数は，単に複素共役をとることで求められる．(4.4.54) の形に表わされたケット $|\alpha>$ に関しては，Θ 演算子は複素共役演算子 K そのものである．K と Θ は基底ケット $|a'>$（すなわち $|\boldsymbol{x}'>$）にかかり，同じ効果を与えるからである．この事情は，ケット $|\alpha>$ が運動量固有ケットによって展開されているとき全く異なることに注意しよう．Θ は $|\boldsymbol{p}'>$ を $|-\boldsymbol{p}'>$ に変化させるので，次のようになる：

$$\begin{aligned}\Theta|\alpha> &= \int d^3p'|-\boldsymbol{p}'><\boldsymbol{p}'|\alpha>^* \\ &= \int d^3p'|\boldsymbol{p}'><-\boldsymbol{p}'|\alpha>^* \end{aligned} \tag{4.4.61}$$

明らかに，時間反転した状態の運動量空間波動関数は，もとの運動量空間波動関数の単なる複素共役ではない．$\phi^*(\boldsymbol{p}')$ ではなくて $\phi^*(-\boldsymbol{p}')$ を，時間反転した状態の運動量空間波動関数に等しいとしなければならない．この例もまた，Θ の具体的な働きが用いられる個々の表示によって異なるという，基本的な性質を表わしている．

スピン 1/2 の系に対する時間反転

スピン —— 特にスピン 1/2 —— を持つ粒子の場合はもっと興味深い．3.2 節で述べたように，固有値 $\hbar/2$ を持つ $\boldsymbol{S}\cdot\hat{\boldsymbol{n}}$ の固有ケットは

$$|\hat{\boldsymbol{n}};+\rangle = e^{-iS_z\alpha/\hbar}e^{-iS_y\beta/\hbar}|+\rangle \tag{4.4.62}$$

で表わせる．ここで $\boldsymbol{n}$ は z-軸となす角 β と方位角 α で特徴づけられている．（4.4.53）式に注意すると

$$\Theta|\hat{\boldsymbol{n}};+\rangle = e^{-iS_z\alpha/\hbar}e^{-iS_y\beta/\hbar}\Theta|+\rangle = \eta|\hat{\boldsymbol{n}};-\rangle \tag{4.4.63}$$

が成り立つ．ここで η は任意の位相因子（絶対値 1 の複素数）を表わす．一方，容易に確かめられるように

$$|\hat{\boldsymbol{n}};-\rangle = e^{-i\alpha S_z/\hbar}e^{-i(\pi+\beta)S_y/\hbar}|+\rangle \tag{4.4.64}$$

である．ところで一般に積 UK が反ユニタリー演算子であることを前に調べた．Θ を UK に等しく取り（4.4.63）と（4.4.64）とを比較すると，K が基底ケット $|+\rangle$ にかかってもそれは変化しないことに注意して

$$\Theta = \eta e^{-i\pi S_y/\hbar}K = -i\eta\left(\frac{2S_y}{\hbar}\right)K \tag{4.4.65}$$

であることが分かる．(4.4.65) を確認する別の方法は，$\chi(\hat{\boldsymbol{n}};+)$ を $|\hat{\boldsymbol{n}};+\rangle$ に対応する 2 成分固有スピノルとするとき $[\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{n}}\chi(\hat{\boldsymbol{n}};+) = \chi(\hat{\boldsymbol{n}};+)]$,

$$- i\sigma_y \chi^*(\hat{\boldsymbol{n}};\ +) \tag{4.4.66}$$

（複素共役 χ^* であることに注意！）が，再び任意の位相因子は別にして $|\hat{\boldsymbol{n}};-\rangle$ に対応する固有スピノルであることを確かめることである．この章の問題 6 を見よ．S_y ないし σ_y が現われるのは，もともと我々の用いている表現では S_z が対角的で，S_y のゼロでない行列要素が純虚数であることによる．

ここで

$$e^{-i\pi S_y/\hbar}|+\rangle = +|-\rangle,\quad e^{-i\pi S_y/\hbar}|-\rangle = -|+\rangle \tag{4.4.67}$$

に注意しよう．(4.4.67) 式を用いると，(4.4.65) のように表わした Θ が，最も一般的なスピン 1/2 ケットに与える効果を計算することができる：

$$\Theta(c_+|+\rangle + c_-|-\rangle) = +\eta c_+^*|-\rangle - \eta c_-^*|+\rangle. \tag{4.4.68}$$

これにもう一度 Θ をかけよう：

$$\begin{aligned}\Theta^2(c_+|+\rangle + c_-|-\rangle) &= -|\eta|^2 c_+|+\rangle - |\eta|^2 c_-|-\rangle \\ &= -(c_+|+\rangle + c_-|-\rangle),\end{aligned} \tag{4.4.69}$$

すなわち

$$\Theta^2 = -1 \tag{4.4.70}$$

（この -1 は，-1 かける恒等演算子の意味である）が任意のスピン方向に対して得られる．これはまさに著しい結果である．我々の結論が位相の選び方には全く依存しないことを，ここで注意しておくのは重要である．(4.4.70) 式は，η としてどのような位相を用いることにしても成立する．これに対し，スピンを持たない系に 2 度続けて Θ をかけたときは，(4.4.58) からも明らかなように

$$\Theta^2 = +1 \tag{4.4.71}$$

であることを注意しよう．

次にもっと一般的に

$$\Theta^2|j\ 半整数 > = -|j\ 半整数 > \tag{4.4.72a}$$

$$\Theta^2|j\ 整数 > = +|j\ 整数 > \tag{4.4.72b}$$

が成り立つことを証明する．つまり Θ^2 の固有値は $(-1)^{2j}$ で与えられる．まず（4.4.65）式が任意の j に対して

$$\Theta = \eta e^{-i\pi J_y/\hbar} K \tag{4.4.73}$$

のように一般化できることに注意する．いま $|j, m>$ を基底ケットにしてケット $|\alpha>$ を展開しておくと

$$\begin{aligned}\Theta(\Theta\sum|jm><jm|\alpha>) &= \Theta(\eta\sum e^{-i\pi J_y/\hbar}|jm><jm|\alpha>^*)\\ &= |\eta|^2 e^{-2i\pi J_y/\hbar}\sum|jm><jm|\alpha>\end{aligned} \tag{4.4.74}$$

が成り立つ．一方，2π 回転に対する角運動量固有状態の性質から，明らかに

$$e^{-2i\pi J_y/\hbar}|jm> = (-1)^{2j}|jm> \tag{4.4.75}$$

であるので（4.4.72）が示せる．

（4.4.72b）式で $|j\ 整数 >$ は，2電子系のスピン状態

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|+-> \pm |-+>) \tag{4.4.76}$$

を表わしてもよいし，あるいはスピンを持たない粒子の軌道状態 $|l, m>$ を表わしてもよい．重要なのは j が整数であることである．同じように $|j\ 半整数 >$ は，例えば任意の配置の3電子系を表わしていてよい．実際，電子のみから構成される系では，電子数が奇数（偶数）の系ならば —— 空間内の方向（例えば，相対的な軌道角運動量）がどうであっても —— Θ^2 に対して奇

（偶）である．この系の状態が $\boldsymbol{J}^2$ の固有状態である必要もない！

ここで（4.4.73）において用いられる位相について，補足的説明をしよう．位置表示に基づく以前の議論により［（4.4.58）を参照］，普通用いられる球面調和関数を使うと，時間反転に対する $|l, m>$ の任意の位相を

$$\Theta|l, m> = (-1)^m|l, -m> \tag{4.4.77}$$

となるように選ぶのが自然であることが分かった．これを一般化して，j が l を表わすか s（整数スピン系に対して）を表わすかにかかわりなく

$$\Theta|j, m> = (-1)^m|j, -m> \quad (j\text{ は整数}) \tag{4.4.78}$$

とする式が好んで用いられる．ここで当然，疑問が生じる．スピン 1/2 の系で，$|j, m>$ がスピン 1/2 の構成要素からウィグナーとシュウィンガーの手法でつくられているとみなしたとき，（4.4.78）と（4.4.72a）は両立するであろうか．すぐ分かることだが，（4.4.73）式中の η を $+i$ に選んでおくと，（4.4.72a）と矛盾しない．実際，一般に任意の j —— 半整数の j でも整数の j でも —— に対して

$$\Theta|j, m> = i^{2m}|j, -m> \tag{4.4.79}$$

とすることができる．この章の問題 9 を見よ．ところがこれは文献に見られる唯一の慣習でないことに，読者は気をつけて欲しい．（例えば Frauenfelder and Henley 1974 を見よ．）物理系に応用する場合は，他の選び方がもっと便利なことがある．例えば $J_\pm$ 演算子の行列要素を単純にする位相の選び方は，時間反転演算子の性質を簡単にする位相の選び方ではない．しかし（4.4.70）は位相の選び方に全く依存していないことを，もう一度強調しよう．

時間反転に対する角運動量固有状態の振舞いについては調べ終えたので，もう一度ここでエルミート演算子の期待値について考察しよう．（4.4.43）式を思い出すと時間反転に対して

$$<\alpha, j, m|A|\alpha, j, m> = \pm <\alpha, j, -m|A|\alpha, j, -m>$$

(4.4.80)

が得られる（i^{2m} の因子は打消される）．ここで A は，球面テンソル $T_q^{(k)}$ の成分であると仮定しよう．ウィグナー・エッカルトの定理により，$q=0$ 成分の行列要素を調べれば十分である．一般に $T^{(k)}$（エルミートと仮定）の時間反転に対する偶奇性は，$q=0$ 成分が

$$\Theta T_{q=0}^{(k)} \Theta^{-1} = \pm T_{q=0}^{(k)} \tag{4.4.81}$$

の上の符号をとるか下の符号をとるかに従って決める．$A = T_0^{(k)}$ に対して等式（4.4.80）は

$$< \alpha, j, m | T_0^{(k)} | \alpha, j, m > = \pm < \alpha, j, -m | T_0^{(k)} | \alpha, j, -m > \tag{4.4.82}$$

となる．ところで（3.6.46)—(3.6.49）式によって $|\alpha, j, -m> = \mathscr{D}(0, \pi, 0)|\alpha, j, m>$ であることが位相を別にして期待される．次に $T_0^{(k)}$ に対して（3.10.22）を用いると

$$\mathscr{D}^\dagger(0, \pi, 0) T_0^{(k)} \mathscr{D}(0, \pi, 0) = (-1)^k T_0^{(k)} + (q \neq 0\text{ 成分}) \tag{4.4.83}$$

が導かれる．上式で $\mathscr{D}_{00}^{(k)}(0, \pi, 0) = P_k(\cos \pi) = (-1)^k$ を用いた．また，$q \neq 0$ 成分の寄与は $<\alpha, j, m|$ と $|\alpha, j, m>$ ではさんだとき現れない．まとめた結果は

$$< \alpha, j, m | T_0^{(k)} | \alpha, j, m > = \pm(-1)^k < \alpha, j, m | T_0^{(k)} | \alpha, j, m> \tag{4.4.84}$$

である．一例として $k=1$ のときを考えると，j，m の固有状態に関してとった期待値 $<\boldsymbol{x}>$ はゼロである．期待値をパリティ固有状態に関してとるならば，パリティ反転から $<\boldsymbol{x}> = 0$ となることは既に知っているであろう［(4.2.41）を見よ］．しかしここで $|\alpha, j, m>$ がパリティ固有ケットである

必要はないことに注意しよう！　例えばスピン 1/2 の粒子に対して，$|j, m>$ は $c_s|s_{1/2}>+c_p|p_{1/2}>$ であることもできる．

電磁場との相互作用；クラマースの縮退

外部電場ないし外部磁場の中にある荷電粒子を考えよう．電荷と相互作用しているのが静電場のみであるとき，ハミルトニアンの相互作用部分は静電場ポテンシャルを $\phi(\boldsymbol{x})$ として

$$V(\boldsymbol{x}) = e\phi(\boldsymbol{x}) \tag{4.4.85}$$

である．$\phi(\boldsymbol{x})$ は時間反転に関して偶の演算子 $\boldsymbol{x}$ の実関数だから

$$[\Theta, H] = 0 \tag{4.4.86}$$

が成り立つ．パリティの場合と異なり，(4.4.86) から興味ある保存則は導かれない．その理由は (4.4.86) が成り立っていても

$$\Theta U(t, t_0) \neq U(t, t_0)\Theta \tag{4.4.87}$$

なので，4.1節の (4.1.9) 以降の議論が適用できないからである．その結果，“時間反転量子数の保存”といったものはない．しかし前に述べた通り，(4.4.86) の要請から位相について自明でない制限が導かれる．スピンを持たない系の縮退していない波動関数が，実関数であるということである [(4.4.59) と (4.4.60) を見よ]．

時間反転不変性のもたらす，もう一つの重要な結果は**クラマースの縮退**である．いま H と Θ が交換し，$|n>$ と $\Theta|n>$ がそれぞれエネルギー固有ケットとその時間反転した状態としよう．(4.4.86) 式より明らかに，$|n>$ と $\Theta|n>$ は同じエネルギー固有値 E_n に属する ($H\Theta|n> = \Theta H|n> = E_n\Theta|n>$)．そこで問題は，$|n>$ は $\Theta|n>$ と同じ状態を表わすかどうかである．もしそうなら，$|n>$ と $\Theta|n>$ はたかだか位相因子だけしか違わない．したがって

$$\Theta|n> = e^{i\sigma}|n> \tag{4.4.88}$$

である．(4.4.88) に Θ をさらに作用させると，$\Theta^2|n> = \Theta e^{i\sigma}|n> = e^{-i\sigma}\Theta|n> = e^{-i\sigma}e^{+i\sigma}|n>$ となる．つまり

$$\Theta^2|n> = +|n> \tag{4.4.89}$$

である．しかし j が半整数の系に対しては，Θ^2 が常に -1 であるからこの関係式は不可能である．したがって同じエネルギーを持つ $|n>$ と $\Theta|n>$ は，異なる状態に対応しなければならない —— すなわち縮退していなければならないという結論に導かれる．これにより例えば外部電場 $\boldsymbol{E}$ の中にある奇数個の電子からなる系では，どんなに $\boldsymbol{E}$ が複雑であろうと，各エネルギー準位は少なくとも二重縮退していることが分かる．このような考えを結晶内の電子に適用するとおもしろい．結晶内では奇数個の電子系と偶数個の電子系とは，非常に異なった振舞いをするのである．歴史的には，このような縮退をシュレーディンガー方程式の具体的な解を検討して推論したのはクラマースであった．続いてウィグナーが，クラマースの縮退は時間反転の不変性の結果であることを指摘した．

次に外部磁場との相互作用に目を向けよう．このときハミルトニアン H は，磁場が外部からかけられるとして

$$\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{B}, \quad \boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{A}+\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{p} \qquad (\boldsymbol{B} = \nabla \times \boldsymbol{A}) \tag{4.4.90}$$

のような項を含む．演算子 $\boldsymbol{S}$ および $\boldsymbol{p}$ は時間反転に対して奇であるので，相互作用の項のために

$$\Theta H \neq H\Theta \tag{4.4.91}$$

となる．自明な例であるが，スピン 1/2 の系では外部磁場があると，スピン上向きの状態 $|+>$ とそれを時間反転した状態 $|->$ はもはや同じエネルギーを持たない．一般に奇数個の電子を含む系のクラマースの縮退は，外部磁場を

かけるととける.

磁場 $\boldsymbol{B}$ を外場として扱うとき，時間反転によって $\boldsymbol{B}$ を変えていないことに注意しよう．その理由は原子内電子を一つの閉じた量子力学系とみなして時間反転演算子を作用させているからである．このことと，以前マックスウェル方程式（4.4.2）やローレンツ力の方程式が，$t \to -t$ とすると共に（4.4.3）の置き換えをしたとき不変であったことを混同してはいけない．そのときは世界全体に，例えば磁場 $\boldsymbol{B}$ を作るコイル中の電流にさえも，時間反転を作用させていたのである！

問　題

1．次の系に対してエネルギー準位と縮退度を下から3番目まで計算せよ．

a．一辺 L の箱中の相互作用していない3個のスピン1/2の粒子．

b．一辺 L の箱中の相互作用していない4個のスピン1/2の粒子．

2．$\mathscr{T}_{\boldsymbol{d}}$ は平行移動演算子（変位ベクトル $\boldsymbol{d}$）を，$\mathscr{D}$（$\hat{\boldsymbol{n}},\phi$）は回転演算子（$\hat{\boldsymbol{n}},\phi$ はそれぞれ回転軸と回転角）を，π はパリティ演算子を表わすとする．次の組合せの中で，交換するものがあればどれか．その理由は？

a．$\mathscr{T}_{\boldsymbol{d}}$ と $\mathscr{T}_{\boldsymbol{d}'}$（$\boldsymbol{d}$ と $\boldsymbol{d}'$ は方向が異なる）.

b．$\mathscr{D}$（$\hat{\boldsymbol{n}},\phi$）と $\mathscr{D}$（$\hat{\boldsymbol{n}}',\phi'$）（$\hat{\boldsymbol{n}}$ と $\hat{\boldsymbol{n}}'$ は方向が異なる）.

c．$\mathscr{T}_{\boldsymbol{d}}$ と π.

d．$\mathscr{D}$（$\hat{\boldsymbol{n}},\phi$）と π.

3．ある量子力学的状態 Ψ が，反交換する二つのエルミート演算子 A，B

$$AB + BA = 0$$

の同時固有状態であると分かっている．状態 Ψ における A と B の固有値に関して何がいえるか．パリティ演算子（$\pi = \pi^{-1} = \pi^{\dagger}$ を満足するよう

に選べる）と運動量演算子を用いて，その論点を説明せよ．

4．スピン 1/2 の粒子が球対称ポテンシャルによって，ある固定された中心に束縛されている．

a．スピン角関数 $\mathscr{Y}_{l=0}^{j=1/2,\, m=1/2}$ を書き表わせ．

b．$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{x})\ \mathscr{Y}_{l=0}^{j=1/2,\, m=1/2}$ を他の $\mathscr{Y}_{l}^{j,m}$ を用いて表わせ．

c．(b) で得られた結果は，演算子 $\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{x}$ が回転および空間反転（パリティ）のもとで持つ変換の性質を見ると理解できることを示せ．

5．弱い（中性カレントの）相互作用のために，原子内電子と核の間には次のようなパリティ非保存のポテンシャルが存在する：

$$V=\lambda[\,\delta^{(3)}(\boldsymbol{x})\,\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{p}+\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{p}\,\delta^{(3)}(\boldsymbol{x})].$$

ここで $\boldsymbol{S}$ と $\boldsymbol{p}$ は電子のスピン演算子と運動量演算子であり，核の位置は原点にとる．その結果，ふつう $|n,\ l,\ j,\ m>$ で特徴づけられるアルカリ原子の基底状態には，他の固有状態からの次のような非常にわずかな寄与が，実際含まれている：

$$|n,\ l,\ j,\ m>\rightarrow|n,\ l,\ j,\ m> + \sum_{n'l'j'm'} C_{n'l'j'm'}|n',\ l',\ j',\ m'>.$$

ゼロでない寄与を与える $(n',\ l',\ j',\ m')$ に関して，対称性のみを考慮して何がいえるか．動径波動関数とエネルギー準位はすべて分かっていると仮定せよ．$C_{n'l'j'm'}$ をどのように計算したらよいか示せ．$(n',\ l',\ j',\ m')$ に対する制限は他にあるか．

6．a．$\Psi(\boldsymbol{x},t)$ をスピンを持たない粒子の，3次元平面波に対応する波動関数とする．$\Psi^{*}(\boldsymbol{x},-t)$ は運動量の向きが逆転した平面波の波動関数であることを示せ．

b．$\chi(\hat{\boldsymbol{n}})$ を $\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{n}}$ の固有値 $+1$ の，2成分固有スピノルとする．$\chi(\hat{\boldsymbol{n}})$ の

具体的な形を用いて（$\hat{\boldsymbol{n}}$ の向きを表わす z-軸となす角 β と方位角 α を用いて），$-i\sigma_2\chi^*(\hat{\boldsymbol{n}})$ がスピンの向きを逆転した２成分固有スピノルであることを確かめよ．

7．a．ハミルトニアンが時間反転に対して不変であることを仮定して，スピンを持たない縮退していない系の波動関数は，どんな瞬間でも常に実数に選べることを証明せよ．

b．平面波状態の波動関数は $t=0$ で，複素関数 $e^{i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}/\hbar}$ で与えられる．これはなぜ時間反転不変性に違反しないのか．

8．$\phi(\boldsymbol{p}')$ を状態 $|\alpha>$ の運動量空間波動関数，すなわち $\phi(\boldsymbol{p}')=<\boldsymbol{p}'|\alpha>$ とする．時間反転した状態 $\Theta|\alpha>$ の運動量空間波動関数は，$\phi(\boldsymbol{p}')$，$\phi(-\boldsymbol{p}')$，$\phi^*(\boldsymbol{p}')$，$\phi^*(-\boldsymbol{p}')$ の中のどれで与えられるか．答が正しいことを説明せよ．

9．a．$\mathscr{D}(R)|j,\ m>$ に対応する時間反転した状態は何か．

b．時間反転と回転操作の性質を用いて

$$\mathscr{D}_{m'm}^{(j)*}(R)=(-1)^{m-m'}\mathscr{D}^{(j)}_{-m'-m}(R)$$

を証明せよ．

c．$\Theta|j,\ m>=i^{2m}|j,\ -m>$ を証明せよ．

10．スピンを持たない粒子が，対称性がなくエネルギー準位に縮退を作らないポテンシャル $V(\boldsymbol{x})$ によって，ある固定された中心に束縛されている．時間反転不変性を用い，任意のエネルギー固有状態に対して

$$<\boldsymbol{L}>=0$$

を証明せよ．（これは**軌道角運動量の消失**と呼ばれている．）このような非縮退固有状態の波動関数が

$$\sum_l\sum_m F_{lm}(r)\ Y_l^m(\theta,\phi)$$

のように展開されたとすると，$F_{lm}(r)$ に対してどのような位相の制限がつくか．

11. スピン 1 の系のハミルトニアンが

$$H = AS_z^2 + B(S_x^2 - S_y^2)$$

で与えられる．この問題を厳密に解き，規格化されたエネルギー固有状態と固有値を求めよ．（スピンに依存するこのようなハミルトニアンは，固体物理で実際に現われる．）このハミルトニアンは時間反転の下で不変であるか．求められた規格化された固有状態は，時間反転の下でどのように変換されるか．

第5章

近　似　法

ハミルトニアンが時間を含まない場合でも含む場合でも量子力学で厳密に解ける問題は少ない．そこで必然的に，我々は何らかの形の近似法に頼らなければならない．高速コンピュータの出現により，求めたい解は必要な精度で，数値的にいつでも得られるのだという人がいるかも知れない．しかし大がかりなコンピュータ計算にかかる前に，近似解のもつ基本的な物理を理解するのは，依然重要である．この章ではもっぱら束縛状態の問題に対する近似解を，ある程度系統的に議論しよう．

5.1　時間を含まない摂動論：縮退のない場合

問題の設定

ここで議論する近似法は，レイリー・シュレーディンガーの摂動論とも呼ばれる時間を含まない摂動論である．これから考察する時間を含まないハミルトニアン H は，次のように二つの部分に分離でき，

$$H = H_0 + V, \tag{5.1.1}$$

このうち $V=0$ とした問題は，厳密なエネルギー固有ケット $|n^{(0)}\rangle$ と厳密なエネルギー固有値 $E_n^{(0)}$ が共に分かっているという意味で，解けているとする．すなわち

$$H_0|n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)}|n^{(0)}\rangle \tag{5.1.2}$$

が知られている．そこで要求されるのは，完全なハミルトニアンに対する問題

$$(H_0 + V)|n\rangle = E_n|n\rangle \tag{5.1.3}$$

の近似的な固有ケットと固有値を見い出すことである．ここで V は**摂動**と呼ばれている．これは一般にポテンシャル演算子の全体ではない．例えば，外部電場ないし磁場中の水素原子を考えることにしよう。非摂動ハミルトニアン H_0 として取られるのは，運動エネルギー $\boldsymbol{p}^2/2m$ および陽子核の存在に基づくクーロンポテンシャル $-e^2/r$ である。外場 $\boldsymbol{E}$ ないし $\boldsymbol{B}$ との相互作用によるポテンシャル部分のみが，摂動 V によって表わされる．

(5.1.3)の代りに，λ を連続な実数パラメータとして

$$(H_0 + \lambda V)|n\rangle = E_n|n\rangle \tag{5.1.4}$$

を解くのが慣例である．このパラメータは，摂動の入る回数が分かるように導入しておく．計算の最後に $\lambda\to 1$ として，もとの強さに戻す．いいかえれば我々は，摂動の強さが制御できると仮定する．パラメータ λ は0から1まで，連続的に変化すると見なせる．$\lambda=0$ の場合は非摂動の問題に対応し，$\lambda=1$ はもとの強さの(5.1.3)式の問題に対応する．摂動法が適用できる物理的状況では，λ の“針”を0から1まで進めるとき，$|n^{(0)}\rangle$ は $|n\rangle$ へ $E_n^{(0)}$ は E_n へ滑らかに移行することが期待される．

この方法はエネルギー固有値とエネルギー固有ケットの λ の級数展開に基づいている．すなわち複素 λ- 平面内の $\lambda=0$ のまわりでのエネルギー固有値と固有ケットの解析性を，暗に仮定している．もちろんこの方法が実際に役に立つのは，展開の1項か2項かを取ることで良い近似が得られる場合である．

2準位問題

基本的方法を系統的に提示するに先立ち，すでに何度も出会った厳密に解ける2準位問題で，λ による展開が実際どのように有効であるか，調べて

みよう．我々のハミルトニアンが

$$H = E_1^{(0)}|1^{(0)}\rangle\langle 1^{(0)}| + E_2^{(0)}|2^{(0)}\rangle\langle 2^{(0)}| + \lambda V_{12}|1^{(0)}\rangle\langle 2^{(0)}| + \lambda V_{21}|2^{(0)}\rangle\langle 1^{(0)}| \tag{5.1.5}$$

のように表わせるとする．ここで $|1^{(0)}\rangle$ と $|2^{(0)}\rangle$ は $\lambda=0$ の問題に対するエネルギー固有ケットで，ここでは $V_{11} = V_{22} = 0$ の場合を考える．この表示で非摂動エネルギー固有ケットから作られる基底を用いると，H は次のように正方行列で表わせる：

$$H = \begin{pmatrix} E_1^{(0)} & \lambda V_{12} \\ \lambda V_{21} & E_2^{(0)} \end{pmatrix} \tag{5.1.6}$$

行列 V はもちろんエルミート的でなければならない．V_{12} と V_{21} が実数である場合，すなわち

$$V_{12} = V_{12}^*, \quad V_{21} = V_{21}^* \tag{5.1.7}$$

であり，かつエルミート性より

$$V_{12} = V_{21} \tag{5.1.8}$$

となる場合を解こう．$|2^{(0)}\rangle$ の位相を $|1^{(0)}\rangle$ に対して調整することにより，いつでもこうできる．このエネルギー固有値を求める問題は，スピンの方向を定める問題を解く場合と全く同様である．スピンのハミルトニアンを(5.1.6)に似せて書くと

$$H = a_0 + \boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{a} = \begin{pmatrix} a_0 + a_3 & a_1 \\ a_1 & a_0 - a_3 \end{pmatrix} \tag{5.1.9}$$

となる．この式で $\boldsymbol{a} = (a_1,\ 0,\ a_3)$ は小さいとし，a_0，a_1，a_3 はすべて実数とする．この問題に対する固有値は，ちょうど

$$E = a_0 \pm \sqrt{{a_1}^2 + {a_3}^2} \tag{5.1.10}$$

であることが分かっている．これと対比させると，(5.1.6)に対する固有値は

$$\left\{ \begin{matrix} E_1 \\ E_2 \end{matrix} \right\} = \frac{E_1^{(0)} + E_2^{(0)}}{2} \pm \sqrt{\frac{(E_1^{(0)} - E_2^{(0)})^2}{4} + \lambda^2 |V_{12}|^2} \tag{5.1.11}$$

となる．問題になるエネルギー尺度，すなわち無摂動問題でのエネルギー固有値の差，に比較して，$\lambda|V_{12}|$ は小さい

$$\lambda|V_{12}| \ll |E_1^{(0)} - E_2^{(0)}| \tag{5.1.12}$$

と仮定しよう．すると展開公式

$$\sqrt{1 + \varepsilon} = 1 + \frac{1}{2}\varepsilon - \frac{\varepsilon^2}{8} + \cdots \tag{5.1.13}$$

を用いることができ，摂動 $\lambda|V_{12}|$ があるときのエネルギー固有値の展開が得られる：

$$E_1 = E_1^{(0)} + \frac{\lambda^2 |V_{12}|^2}{E_1^{(0)} - E_2^{(0)}} + \cdots\cdots$$

$$(5.1.14)$$

$$E_2 = E_2^{(0)} + \frac{\lambda^2 |V_{12}|^2}{E_2^{(0)} - E_1^{(0)}} + \cdots\cdots$$

これらの表式は，すぐあとで展開する一般論を用いて容易に得られるものである．スピン方向を定める問題と類似させて，エネルギーケットを書き下すこともできる．

読者は，十分に弱い摂動に対して摂動展開が常に存在すると信じるに至ったかも知れない．残念ながらいつでもこうなるのではない．初等的な例として，質量 m の粒子が深さ V_0 の非常に弱い井戸型ポテンシャル$(-a < x <$

a に対して $V = -V_0$, $|x| > a$ に対して $V = 0$)の中にある1次元問題を考えよう．この問題にはエネルギーが

$$E = -\frac{2ma^2}{\hbar^2}|\lambda V_0|^2, \quad \lambda > 0 \text{ の引力に対して} \tag{5.1.15}$$

の一つの束縛状態がある．この井戸を自由粒子のハミルトニアンにつけ加わる非常に弱い摂動と見なし，(5.1.15)の結果を基底状態のエネルギー変化がゼロから $|\lambda V_0|^2$ に比例するものになったものと解釈することもできよう．特に(5.1.15)は V_0 の2次だから，これを2次の摂動論に従って計算した基底状態のエネルギー変化と関連させたくなるかも知れない．しかしこの見方は誤りである．もしそうだとしたら，λ が負の斥力ポテンシャルに対しても，この系には $E < 0$ の状態が許されることになり，全くのナンセンスな結論になる．

ここで級数展開(5.1.14)の収束半径を調べよう．厳密な表式(5.1.11)に戻り，これを複素変数 λ の関数と見なすと，$|\lambda|$ がゼロから増加するとき

$$\lambda|V_{12}| = \frac{\pm i(E_1^{(0)} - E_2^{(0)})}{2} \tag{5.1.16}$$

で分岐点に出会うことが分かる．もともとの強さ $\lambda = 1$ に対しては，級数展開の収束条件は

$$|V_{12}| < \frac{|E_1^{(0)} - E_2^{(0)}|}{2} \tag{5.1.17}$$

である．この条件が満たされないと，摂動展開(5.1.14)は意味を失なう．*

摂動展開の形式論

これから我々の解きたい基本的問題をもう少し正確に述べよう．まず我々は

* (5.1.44) 式に続く，収束性についての議論を参照せよ．そこでは一般的注意が述べてある．

$$H_0|n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)}|n^{(0)}\rangle \tag{5.1.18}$$

のエネルギー固有ケットとエネルギー固有値とを，完全にまた厳密に知っていると仮定する．この $\{|n^{(0)}\rangle\}$ の組は，閉包関係 $1=\sum_n|n^{(0)}\rangle\langle n^{(0)}|$ が成立しているという意味で，完全である．さらにここでは，エネルギースペクトルが縮退していないことを仮定する．次の節でこの仮定をゆるめよう．我々の関心は，(5.1.4) 式で定義された問題のエネルギー固有値と固有ケットを求めることである．(5.1.18) 式に合わせて(5.1.4)を

$$(H_0+\lambda V)|n\rangle_\lambda = E_n^{(\lambda)}|n\rangle_\lambda \tag{5.1.19}$$

と書くべきであろう．するとエネルギー固有値 $E_n^{(\lambda)}$ とエネルギー固有ケット $|n\rangle_\lambda$ が，連続パラメータ λ の関数であることが表わせる．しかし普通は，この正確ではあるがわずらわしい記号を省略しよう．

連続パラメータ λ がゼロから増加するとき，n 番目の固有ケットのエネルギー固有値 E_n は，摂動のないときの値 $E_n^{(0)}$ からずれることが予想される．そこで n 番目の準位のエネルギーのずれを

$$\Delta_n \equiv E_n - E_n^{(0)} \tag{5.1.20}$$

のように定義する．(近似的に)解こうとするもともとのシュレーディンガー方程式は

$$(E_n^{(0)}-H_0)|n\rangle = (\lambda V-\Delta_n)|n\rangle \tag{5.1.21}$$

である．ここで演算子 $E_n^{(0)}-H_0$ を逆にしてかけたくなるかも知れない．しかし一般に逆演算子 $1/(E_n^{(0)}-H_0)$ は，$|n^{(0)}\rangle$ に作用するかも知れないので，うまく定義できない．いまは幸いにして，$(\lambda V-\Delta_n)|n\rangle$ は $|n^{(0)}\rangle$ に比例する成分を含まない．これは(5.1.21)の両辺に左から $\langle n^{(0)}|$ をかけると容易に分かる：

$$\langle n^{(0)}|(\lambda V-\Delta_n)|n\rangle = 0. \tag{5.1.22}$$

補足的な射影演算子

$$\phi_n \equiv 1 - |n^{(0)}\rangle\langle n^{(0)}| = \sum_{k \neq n} |k^{(0)}\rangle\langle k^{(0)}| \qquad (5.1.23)$$

を定義したとしよう．逆演算子 $1/(E_n^{(0)} - H_0)$ は，右側の ϕ_n にかかるとき，よく定義されている．すなわち

$$\frac{1}{E_n^{(0)} - H_0}\phi_n = \sum_{k \neq n} \frac{1}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} |k^{(0)}\rangle\langle k^{(0)}| \qquad (5.1.24)$$

である．(5.1.22)と(5.1.23)から明らかに

$$(\lambda V - \Delta_n)|n\rangle = \phi_n(\lambda V - \Delta_n)|n\rangle \qquad (5.1.25)$$

が成り立つ．そこで(5.1.21)を

$$|n\rangle \overset{?}{=} \frac{1}{E_n^{(0)} - H_0}\phi_n(\lambda V - \Delta_n)|n\rangle \qquad (5.1.26)$$

と書きかえたくなるかも知れない．しかし，$\lambda \to 0$ のとき $|n\rangle \to |n^{(0)}\rangle$，$\Delta_n \to 0$ とならなければならないから，これは正しくない．だが $\lambda \neq 0$ のときにも，$|n\rangle$ には斉次方程式(5.1.26)の一つの解，$c_n|n^{(0)}\rangle$ を付け加えることができる．そこで題意にあう最終的な形は

$$|n\rangle = c_n(\lambda)|n^{(0)}\rangle + \frac{1}{E_n^{(0)} - H_0}\phi_n(\lambda V - \Delta_n)|n\rangle \qquad (5.1.27)$$

となる．ここで

$$\lim_{\lambda \to 0} c_n(\lambda) = 1 \qquad (5.1.28)$$

であり

$$c_n(\lambda) = \langle n^{(0)}|n\rangle \qquad (5.1.29)$$

であることに注意しよう．

後に分かる理由により，通常の規格化条件

$$\langle n|n\rangle = 1 \tag{5.1.30}$$

の代りに，$\lambda \neq 0$ のときにも

$$\langle n^{(0)}|n\rangle = c_n(\lambda) = 1 \tag{5.1.31}$$

と置く方が便利である．$c_n \neq 1$ と置いたとしても単に共通にかかる因子が導入されるだけだから，全体の規格化が気にならないときはいつも $c_n = 1$ と置くことができる．このように場合に応じて，いつも計算の一番終りにケットを規格化することができる．また

$$\frac{1}{E_n^{(0)} - H_0}\phi_n \longrightarrow \frac{\phi_n}{E_n^{(0)} - H_0} \tag{5.1.32}$$

と書いたり，同じように

$$\frac{1}{E_n^{(0)} - H_0}\phi_n = \phi_n \frac{1}{E_n^{(0)} - H_0} = \phi_n \frac{1}{E_n^{(0)} - H_0}\phi_n \tag{5.1.33}$$

と書き表わすこともある．これを用いると

$$|n\rangle = |n^{(0)}\rangle + \frac{\phi_n}{E_n^{(0)} - H_0}(\lambda V - \Delta_n)|n\rangle \tag{5.1.34}$$

が得られる．(5.1.22)と(5.1.31)とから

$$\Delta_n = \lambda\langle n^{(0)}|V|n\rangle \tag{5.1.35}$$

となることにも注目しよう．

二つの方程式(5.1.34)と(5.1.35)からすべてが求まる．基本的解法として，$|n\rangle$ および Δ_n を λ の級数に展開し，係数をあわせる方法をとる．

(5.1.34)と(5.1.35)が，λの0から1までのあらゆる値に対して成り立つ恒等式であるので，この解法は正当なものである．まず

$$
\begin{aligned}
|n\rangle &= |n^{(0)}\rangle + \lambda|n^{(1)}\rangle + \lambda^2|n^{(2)}\rangle + \cdots \\
\Delta_n &= \lambda\Delta_n^{(1)} + \lambda^2\Delta_n^{(2)} + \cdots\cdots
\end{aligned}
\tag{5.1.36}
$$

と表わすことから始めよう．(5.1.36)を(5.1.35)に代入し，λのそれぞれのべきの係数を等しくすると

$$
\begin{aligned}
0(\lambda^1):&\quad \Delta_n^{(1)} = \langle n^{(0)}|V|n^{(0)}\rangle \\
0(\lambda^2):&\quad \Delta_n^{(2)} = \langle n^{(0)}|V|n^{(1)}\rangle \\
\vdots &\quad\quad \vdots \\
0(\lambda^N):&\quad \Delta_n^{(N)} = \langle n^{(0)}|V|n^{(N-1)}\rangle \\
\vdots &\quad\quad \vdots
\end{aligned}
\tag{5.1.37}
$$

が得られる．これよりエネルギーのずれをλ^Nの次数まで計算するには，$|n\rangle$がλ^{N-1}の次数まで分かれば十分である．次に(5.1.34)に注目する．これを(5.1.36)を用いて展開すれば

$$
\begin{aligned}
&|n^{(0)}\rangle + \lambda|n^{(1)}\rangle + \lambda^2|n^{(2)}\rangle + \cdots\cdots \\
&= |n^{(0)}\rangle + \frac{\phi_n}{E_n^{(0)} - H_0}(\lambda V - \lambda\Delta_n^{(1)} - \lambda^2\Delta_n^{(2)} - \cdots\cdots) \\
&\quad \times(|n^{(0)}\rangle + \lambda|n^{(1)}\rangle + \cdots\cdots)
\end{aligned}
\tag{5.1.38}
$$

が得られる．λの係数を等しく置くと

$$
0(\lambda):|n^{(1)}\rangle = \frac{\phi_n}{E_n^{(0)} - H_0} V|n^{(0)}\rangle \tag{5.1.39}
$$

が求まる．ここで$\phi_n\Delta_n^{(1)}|n^{(0)}\rangle = 0$を用いた．$|n^{(1)}\rangle$が求まったのでこれを用い，$\Delta_n^{(2)}$に対する以前の表式(5.1.37)に戻ると次の結果が得られる：

$$\Delta_n^{(2)} = \langle n^{(0)}|\, V \frac{\phi_n}{E_n^{(0)} - H_0}\, V\, |n^{(0)}\rangle. \tag{5.1.40}$$

$\Delta_n^{(2)}$ が分かると，(5.1.39)も用いてケット方程式(5.1.38)の λ^2-項を次のように算定することができる：

$$0(\lambda^2):\ |n^{(2)}\rangle = \frac{\phi_n}{E_n^{(0)} - H_0}\, V \frac{\phi_n}{E^{(0)} - H_0}\, V\, |n^{(0)}\rangle$$

$$- \frac{\phi_n}{E_n^{(0)} - H_0} \langle n^{(0)}|\, V\, |n^{(0)}\rangle \frac{\phi_n}{E_n^{(0)} - H_0}\, V\, |n^{(0)}\rangle. \tag{5.1.41}$$

明らかに，このようにいくらでも続けていくことができる．我々の演算子法は大変簡潔で，添字を毎回書き下す必要はない．もちろん実際の計算を行うときは，最後に(5.1.23)で与えられる具体的な ϕ_n の形を用いなければならない．

これまでのことをまとめて，エネルギーのずれの具体的な展開を書き下すと

$$\Delta_n \equiv E_n - E_n^{(0)}$$

$$= \lambda V_{nn} + \lambda^2 \sum_{k\neq n} \frac{|V_{nk}|^2}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} + \cdots\cdots \tag{5.1.42}$$

となる．ここで

$$V_{nk} \equiv \langle n^{(0)}|\, V\, |k^{(0)}\rangle \neq \langle n|\, V\, |k\rangle \tag{5.1.43}$$

である．すなわち行列要素は，非摂動ケットに関してとる．この展開式を2準位問題にあてはめると，以前の表式(5.1.14)を再現することに注意しよう．一方，摂動を受けたケットに対する展開式は次のようになる：

$$|n\rangle = |n^{(0)}\rangle + \lambda \sum_{k\neq n} |k^{(0)}\rangle \frac{V_{kn}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}$$

$$+ \lambda^2 \left(\sum_{k\neq n} \sum_{l\neq n} \frac{|k^{(0)}\rangle V_{kl} V_{ln}}{(E_n^{(0)} - E_k^{(0)})(E_n^{(0)} - E_l^{(0)})} - \sum_{k\neq n} \frac{|k^{(0)}\rangle V_{nn} V_{kn}}{(E_n^{(0)} - E_k^{(0)})^2} \right) + \cdots. \tag{5.1.44}$$

(5.1.44)式は，n 番目の準位がもはや非摂動ケット $|n^{(0)}>$ と比例しておらず，他の非摂動エネルギーケットをも成分に持つようになることを示している．いいかえれば摂動 V は，種々の非摂動エネルギー固有ケットを混合する．

ここで一般的な注意を少し述べよう．第一に，1次のエネルギーのずれを求めるには，非摂動ケットに関する V の期待値を計算すれば十分である．第二に，2次のエネルギーのずれの表式(5.1.42)から明らかなように，二つのエネルギー準位，たとえば i 準位と j 準位は V_{ij} で結びつけられると，たがいに反発する傾向にある．低い方の準位，例えば i 準位は高い方の j 準位との混合の結果，$|V_{ij}|^2/(E_j^{(0)}-E_i^{(0)})$ だけエネルギーが下がろうとし，一方 j 準位のエネルギーは，同じ量だけ上がる．これは，摂動により結びついた一対のエネルギー準位は，摂動の大きさが変化したとき準位の交差を起こさないという，**準位不交差の定理**の一例である．

無視できない行列要素を持つ準位が一組より多いとしよう．いまエネルギーを問題にするケット $|n>$ は基底状態をあらわすことにする．このとき(5.1.42)中で2次のエネルギーのずれを表わす各項は負である．これは，基底状態に対しては2次のエネルギーのずれが常に負であることを意味する．すなわち混合の結果，最低状態のエネルギーはさらに下がろうとしているのである．

摂動展開(5.1.42)および(5.1.44)が，$|V_{ij}/(E_i^{(0)}-E_j^{(0)})|$ が十分に“小さい”とき，収束するのは明らかである．H_0 が単に運動エネルギー演算子である場合，収束条件をもう少し限定することができる（このときこのレイリー・シュレーディンガー摂動展開は，ボルン展開級数である）：ボルン級数は，エネルギー $E_0<0$ に対して，H_0+V も H_0-V もエネルギー $E<E_0$ の束縛状態を持たないときのみ，収束する．(R. G. Newton 1982. p.233)[†]

---

† 訳注：ボルン級数 $\sum_n\left(\frac{1}{E_0-H_0}V\right)^n$ の収束性を論じている．

波動関数のくりこみ（再規格化）

続いて摂動を受けたケットの規格化を検討しよう．我々の便宜上用いた規格化は(5.1.31)であることを思い出すと，摂動を受けたケット $|n\rangle$ が通常の方法で規格化されていないことが分かる．摂動を受けたケットの規格化は

$$|n\rangle_N = Z_n^{1/2}|n\rangle \tag{5.1.45}$$

を定義するとできる．Z_n は ${}_N\langle n|n\rangle_N = 1$ を満たす単なる定数である．左側から $\langle n^{(0)}|$ をかけると，[(5.1.31)により]

$$Z_n^{1/2} = \langle n^{(0)}|n\rangle_N \tag{5.1.46}$$

が得られる．Z_n の物理的意味は何であろうか．$|n\rangle_N$ は普通の規格化の要請(5.1.30)を満たしているから，Z_n は摂動を受けたエネルギー固有状態が，対応する非摂動エネルギー固有状態に見出される確率と見なすことができる．等式

$$ {}_N\langle n|n\rangle_N = Z_n\langle n|n\rangle = 1 \tag{5.1.47}$$

に注意すると

$$\begin{aligned} Z_n^{-1} = \langle n|n\rangle &= (\langle n^{(0)}| + \lambda\langle n^{(1)}| + \lambda^2\langle n^{(2)}| + \cdots\cdots) \\ &\quad \times(|n^{(0)}\rangle + \lambda|n^{(1)}\rangle + \lambda^2|n^{(2)}\rangle \cdots\cdots) \\ &= 1 + \lambda^2\langle n^{(1)}|n^{(1)}\rangle + 0(\lambda^3) \end{aligned} \tag{5.1.48a}$$

となるので λ^2 の次数までとると，摂動を受けた状態が対応する非摂動状態に見出される確率として

$$Z_n \simeq 1 - \lambda^2\sum_{k\neq n}\frac{|V_{kn}|^2}{(E_n^{(0)} - E_k^{(0)})^2} \tag{5.1.48b}$$

が得られる．(5.1.48b)の第2項は，$|n^{(0)}\rangle$ と異なる状態へ“漏れる”確率と

解釈できる．Z の確率的解釈に基づいて期待されるように，Z_nは 1 より小さいことに注目しよう．

また興味深いことに，(5.1.42)により λ^2 の次数までの範囲で，Z_n が E_n の $E_n^{(0)}$ に関する微分と

$$Z_n = \frac{\partial E_n}{\partial E_n^{(0)}} \tag{5.1.49}$$

のように関連していることを，記しておこう．もちろんE_nの$E_n^{(0)}$に関する偏微分をとる際に，V の行列要素を定数と見なさなければならない．実は(5.1.49)の結果は極めて一般的であり，2 次の摂動論に限ったものではない．

初歩的な例

今まで展開してきた摂動法の説明のために，二つの例を検討しよう．最初に考える例は調和振動子であり，非摂動ハミルトニアンは通常のものである：

$$H_0 = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2. \tag{5.1.50}$$

バネ定数 $k = m\omega^2$ が少し変化したと仮定しよう．この変更は余分なポテンシャル

$$V = \frac{1}{2}\varepsilon m\omega^2 x^2 \tag{5.1.51}$$

を加えたものとして表現できる．ε は $\varepsilon \ll 1$ の無次元パラメータである．これは見ようによっては，摂動論を適用する問題として世界で一番馬鹿らしいものである．この厳密解は，ω を

$$\omega \to \sqrt{1+\varepsilon}\,\omega \tag{5.1.52}$$

のように変えればただちに求まるからである．しかしこの問題では摂動の近似

法と厳密な方法との比較ができるので，教育的な例といえる．

ここで V があるときの新しい基底状態のケット $|0>$ と，基底状態のエネルギーのずれ Δ_0 を問題にしよう：

$$|0> = |0^{(0)}> + \sum_{k\neq 0} |k^{(0)}> \frac{V_{k0}}{E_0^{(0)} - E_k^{(0)}} + \cdots\cdots \qquad (5.1.53a)$$

と

$$\Delta_0 = V_{00} + \sum_{k\neq 0} \frac{|V_{k0}|^2}{E_0^{(0)} - E_k^{(0)}} + \cdots\cdots \qquad (5.1.53b)$$

である．ここで関係ある行列要素は

$$\begin{aligned} V_{00} &= \left(\frac{\varepsilon m\omega^2}{2}\right) <0^{(0)}|x^2|0^{(0)}> = \frac{\varepsilon \hbar \omega}{4} \\ V_{20} &= \left(\frac{\varepsilon m\omega^2}{2}\right) <2^{(0)}|x^2|0^{(0)}> = \frac{\varepsilon \hbar \omega}{2\sqrt{2}} \end{aligned} \qquad (5.1.54)$$

である(この章末の問題5を見よ)．他のすべての V_{k0} の形の行列要素はゼロである．(5.1.53a)と(5.1.53b)のゼロでないエネルギー分母は $-2\hbar\omega$ であることに注意して，以上をまとめると

$$|0> = |0^{(0)}> - \frac{\varepsilon}{4\sqrt{2}} |2^{(0)}> + 0(\varepsilon^2) \qquad (5.1.55a)$$

と

$$\Delta_0 = E_0 - E_0^{(0)} = \hbar\omega\left[\frac{\varepsilon}{4} - \frac{\varepsilon^2}{16} + 0(\varepsilon^3)\right] \qquad (5.1.55b)$$

が得られる．基底状態のケットには摂動の結果，もとの非摂動エネルギー固有ケット $\{|n^{(0)}>\}$ を用いて展開したとき，第2励起状態が成分に加わっていることに注意しよう．第1励起状態の成分がないのは，全体の H がパリティ不変であるので驚くに当らない．つまりエネルギー固有状態はパリティの固有状態

であると期待される.

エネルギーのずれに対して厳密解との比較は容易にできる：

$$\frac{\hbar\omega}{2} \to \left(\frac{\hbar\omega}{2}\right)\sqrt{1+\varepsilon} = \left(\frac{\hbar\omega}{2}\right)\left[1+\frac{\varepsilon}{2}-\frac{\varepsilon^2}{8}+\cdots\cdots\right]. \quad (5.1.56)$$

これは(5.1.55b)と完全に一致している．摂動を受けたケットに対しては，波動関数の変化を調べよう．Vのないとき基底状態の波動関数は

$$\langle x|0^{(0)}\rangle = \frac{1}{\pi^{1/4}}\frac{1}{\sqrt{x_0}}e^{-x^2/2x_0^2} \quad (5.1.57)$$

$$x_0 \equiv \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \quad (5.1.58)$$

である．(5.1.52)を代入すると

$$x_0 \to \frac{x_0}{(1+\varepsilon)^{1/4}} \quad (5.1.59)$$

となるから

$$\begin{aligned}\langle x|0^{(0)}\rangle &\to \frac{1}{\pi^{1/4}\sqrt{x_0}}(1+\varepsilon)^{1/8}\exp\left[-\left(\frac{x^2}{2x_0^2}\right)(1+\varepsilon)^{1/2}\right]\\ &\simeq \frac{1}{\pi^{1/4}\sqrt{x_0}}e^{-x^2/2x_0^2}+\frac{\varepsilon}{\pi^{1/4}\sqrt{x_0}}e^{-x^2/2x_0^2}\left[\frac{1}{8}-\frac{1}{4}\frac{x^2}{x_0^2}\right]\\ &= \langle x|0^{(0)}\rangle - \frac{\varepsilon}{4\sqrt{2}}\langle x|2^{(0)}\rangle \end{aligned} \quad (5.1.60)$$

が得られる．[訳注：これは(5.1.55a)と一致する.] ここで

$$\begin{aligned}\langle x|2^{(0)}\rangle &= \frac{1}{2\sqrt{2}}\langle x\,|\,0^{(0)}\rangle H_2\left(\frac{x}{x_0}\right)\\ &= \frac{1}{2\sqrt{2}}\frac{1}{\pi^{1/4}}\frac{1}{\sqrt{x_0}}e^{-x^2/2x_0^2}\left[-2+4\left(\frac{x}{x_0}\right)^2\right]\end{aligned} \quad (5.1.61)$$

を用いている．$H_2(x/x_0)$ は2次のエルミート多項式である．

縮退のない摂動論のもう一つの例として，**2次のシュタルク効果**を議論しよう．水素原子または(球対称な)閉殻の外側に1個の価電子を持つ水素様原子のような一電子原子に，z-軸の正方向に一様な電場をかける．ハミルトニアンHは二つの部分に分けられる：

$$H_0 = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} + V_0(r) \qquad \text{と} \qquad V = -e|\boldsymbol{E}|z \quad (\text{電子では} e<0). \tag{5.1.62}$$

非摂動問題(H_0のみ)に対するエネルギー固有ケットとエネルギースペクトラムは，完全に分かっているとする．この問題で電子スピンは重要でないので，スピンの自由度は無視しエネルギー準位は縮退していないと仮定する．しかしこの仮定は，V_0が純粋のクーロンポテンシャルである水素原子の $n \neq 1$ の準位に対しては成り立たない．そのような場合は後に取り扱う．エネルギーのずれは

$$\Delta_k = -e|\boldsymbol{E}|z_{kk} + e^2|\boldsymbol{E}|^2 \sum_{j \neq k} \frac{|z_{kj}|^2}{E_k^{(0)} - E_j^{(0)}} + \cdots \tag{5.1.63}$$

で与えられる．ここでは主量子数nと混同するのを防ぐため，nでなくてkを用いた．縮退がないので $|k^{(0)}\rangle$ はパリティの固有状態と期待されるから，4.2節で見たように

$$z_{kk} = 0 \tag{5.1.64}$$

である．物理的に述べると，いま1次のシュタルク効果はありえない．つまり原子は永久電気双極子を持たないので，エネルギーのずれに $|\boldsymbol{E}|$ に比例する項はない．したがってエネルギーのずれは，$e^3|\boldsymbol{E}|^3$ やそれより高い次数の項を無視すると，$|\boldsymbol{E}|$ の2次である．

次に(5.1.63)に現われる z_{kj} に着目しよう．ここで k(または j)は

$(n,\ l,\ m)$ や $(n',\ l',\ m')$ を表わすひとまとめの指標である．第一に，角運動量（$T^{(1)}_{q=0}$ としたウィグナー・エッカルト定理）とパリティを考慮すると導かれる選択則［(3.10.39)を見よ］

$$\langle n',\, l',\, m' \,|\, z \,|\, n,\, l,\, m\rangle = 0, \qquad \begin{pmatrix} l' = l \pm 1 & \\ & \text{以外} \\ m' = m & \end{pmatrix} \tag{5.1.65}$$

を思い出そう．

別の方法でこの m-選択則を見ることもできる．V が存在すると，z 軸の正方向を選んだ外部電場のために，ハミルトニアンの完全な球対称性は壊れる．しかし V（したがって全体の H)は，z 軸のまわりの回転に関して依然として不変である．いいかえれば軸対称性は依然として残っている．形式的に表わすと，これは

$$[\,V,\, L_z\,] = 0 \tag{5.1.66}$$

という事実に反映している．すなわち V があるにも拘らず L_z はなおよい量子数である．その結果，摂動項は等しい m —— この場合には $m=0$ —— を持つ L_z の固有ケットの重ね合せとして書ける．このことはあらゆる次数のケットに対して正しく，特に１次のケットについても正しい．さらに，２次のエネルギーのずれは１次のケットから求められるから［(5.1.40) を見よ］，和に寄与するのがなぜ $m=0$ の項だけなのかが分かる．

原子の分極率 α は，原子状態のエネルギーのずれを用いて次のように定義される：

$$\Delta = -\frac{1}{2}\alpha |\boldsymbol{E}|^2. \tag{5.1.67}$$

特別な場合として，水素原子の基底状態を考えよう．水素原子のスペクトルは励起状態では縮退しているが，基底状態（スピンは無視する）は縮退していないので縮退のない摂動論の式が適用できる．基底状態 $|0^{(0)}\rangle$ を $(n,\ l,\ m)$ の記号で $(1,\ 0,\ 0)$ と記すと

$$\alpha = -2e^2 \sum_{k \neq 0}^{\infty} \frac{|<k^{(0)}|z|1,0,0>|^2}{E_0^{(0)} - E_k^{(0)}} \qquad (5.1.68)$$

となる．ここで k に関する和はすべての束縛状態 $|n, l, m>(n>1)$ ばかりでなく，水素の正のエネルギーの連続状態をも含む．

(5.1.68) の和を様々な知識を動員して近似的に評価したり，厳密に計算したりする多くの方法がある．ここではすべての方法の中で最も簡単なものを紹介しよう．(5.1.68) の分母が一定であると仮定する．するとこの和は

$$\sum_{k \neq 0} |<k^{(0)}|z|1,0,0>|^2 = \sum_{\text{すべての}k} |<k^{(0)}|z|1,0,0>|^2$$
$$= <1,0,0|z^2|1,0,0> \qquad (5.1.69)$$

を考慮すると求められる．上式で最後の段階に，完備関係式を用いている．一方 $<z^2>$ は基底状態に対して次のように容易に計算できる：

$$<z^2> = <x^2> = <y^2> = \frac{1}{3}<r^2>. \qquad (5.1.70)$$

さらに波動関数の具体的な形を用いると，a_0 をボーア半径として

$$<z^2> = a_0^2$$

が得られる．やっかいなことに，分極率 α に対する表式は $E_k^{(0)}$ に依存するエネルギー分母を含む．しかし (5.1.68) の各エネルギー分母に対して，不等式

$$-E_0^{(0)} + E_k^{(0)} \geq -E_0^{(0)} + E_1^{(0)} = \frac{e^2}{2a_0}\left(1 - \frac{1}{4}\right) \qquad (5.1.71)$$

が成り立つことが分かっている．この結果，水素原子の基底状態での分極率に対する上限を求めることができる．すなわち

$$\alpha < \frac{16a_0^3}{3} \simeq 5.3a_0^3 \qquad (5.1.72)$$

である．(5.1.68) の和は，A．ダルガルノと J．T．ルイスの方法（例えば Merzbacher 1970，p.424 参照）を用いると，厳密に計算できることが分かっていて，これは実験により測定された値にも一致する．厳密解は

$$\alpha = \frac{9a_0^3}{2} = 4.5a_0^3 \qquad (5.1.73)$$

である．同じ結果は(摂動論を用いないで)シュレーディンガー方程式を放物線座標を用いて厳密に解いても得られる．

5.2 時間を含まない摂動論：縮退のある場合

前節で展開した摂動論は，非摂動エネルギー固有ケットが縮退していると役に立たない．前節の方法が仮定しているのは，摂動を受けたケットが $\lambda \to 0$ で近づいていく，エネルギー $E_n^{(0)}$ を持つよく定義された唯一の非摂動ケットの存在である．しかし縮退があるとき，非摂動ケットの任意の線形結合も，同じ非摂動エネルギーを持つ．このような場合，摂動を受けたケットが $\lambda \to 0$ の極限でどのような線形結合に帰するかは，あらかじめ明らかでない．ここではエネルギー固有値だけで非摂動ケットを指定するのは十分でなく，他のある観測量が完全な表示をするために必要なのである．もう少し明確に述べると，縮退のあるとき我々は基底ケットとして，H_0 と他のある観測量 A の同時固有ケットを取ることができ，非摂動エネルギー固有ケットを $|k^{(0)}\rangle$ によって前と同じように分類することができる．ここで k はエネルギー固有値および A の固有値の両方を表わすひとまとめにした指標である．摂動演算子 V が A と交換しないとき，H（摂動を含む）の**ゼロ次**の固有ケット［訳注：$\lambda \to 0$ の極限のケット］は，実際 A の固有ケットでない．

少し実際の様子を見よう．(5.1.42)や(5.1.44)のような公式をそのまま適用すると明らかに困難に陥いる．すなわち

$$\frac{V_{nk}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \tag{5.2.1}$$

が，V_{nk} がゼロでなく $E_n^{(0)}$ と $E_k^{(0)}$ が等しいとき発散するからである．このような場合に対処するために，前節の方法を変更しなければならない．

縮退のあるときはいつでも，非摂動系の基底の組を自由に選べる．この自由度を是非とも利用するべきである．直観的に考えると，エネルギー分母がゼロになることから起こる困難は，V が非対角行列要素を持たないように（(5.2.1) で $V_{nk}=0$ になるように）基底を選べば回避できるであろう．いいかえれば縮退した非摂動ケットで張られる部分空間の中で，H（摂動を含む）を対角化する縮退した非摂動ケットの線形結合を用いるのがよいであろう．事実これは正しい手続きとして用いられる．

摂動 V がかけられる前に，g 重の縮退があったとしよう．すなわちすべて同じ非摂動エネルギー $E_D^{(0)}$ を持つ g 個の固有ケットが存在していた．これらのケットを $\{|m^{(0)}\rangle\}$ と記そう．一般に摂動は縮退を解き，すべて異なるエネルギーを持つ g 個の摂動を受けた固有ケットが生じる．これらが形成する組を $\{|l\rangle\}$ としよう．λ がゼロに近づくとき $|l\rangle \rightarrow |l^{(0)}\rangle$ となり，それぞれの $|l^{(0)}\rangle$ は H_0 の固有ケットですべて同じエネルギー $E_D^{(0)}$ を持つ．二つの非摂動固有ケットの組 $\{|l^{(0)}\rangle\}$ と $\{|m^{(0)}\rangle\}$ は同じ縮退した部分空間 —— これを D と呼ぶ —— を張るが，$\{|l^{(0)}\rangle\}$ が $\{|m^{(0)}\rangle\}$ と必ずしも一致することはない．そこで

$$|l^{(0)}\rangle = \sum_{m\in D} \langle m^{(0)}|l^{(0)}\rangle |m^{(0)}\rangle \tag{5.2.2}$$

と書くことができる．この和は，縮退した部分空間内のエネルギー固有ケットに関してとる．

摂動を受けたケット $|l\rangle$ に対するシュレーディンガー方程式は，縮退のない場合 (5.1.21) と同じである．すなわち

$$(E_D^{(0)} - H_0)|l\rangle = (\lambda V - \Delta_l)|l\rangle \tag{5.2.3}$$

である．$|l>$ を

$$|l> = |l^{(0)}> + \lambda|l^{(1)}> + \cdots \tag{5.2.4}$$

のように展開してみよう．λ^0 の次数では，[(5.1.36)参照] 単につまらない恒等式 $0=0$ が得られる．λ の次数の項を集めると

$$\begin{aligned}(E_D^{(0)} - H_0)|l^{(1)}> &= (V - \Delta_l^{(1)})|l^{(0)}> \\ &= (V - \Delta_l^{(1)})\left[\sum_{m\in D} |m^{(0)}><m^{(0)}|l^{(0)}>\right]\end{aligned} \tag{5.2.5}$$

が得られる．$<m'^{(0)}|$ を $\{<m^{(0)}|\}$ の組から取った縮退した固有ブラの一つとして，これを (5.2.5) に左からかけると

$$\sum_m V_{m'm} <m^{(0)}|l^{(0)}> = \Delta_l^{(1)} <m'^{(0)}|l^{(0)}> \tag{5.2.6}$$

が得られる．ところでこれは，演算子 V の固有ベクトルとその固有値を求める固有値方程式と見なすことができる．具体的に行列の形で表わすと

$$\begin{pmatrix} V_{11} & V_{12} & \cdots \\ V_{21} & V_{22} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}\begin{pmatrix} <1^{(0)}|l^{(0)}> \\ <2^{(0)}|l^{(0)}> \\ \vdots \end{pmatrix} = \Delta_l^{(1)}\begin{pmatrix} <1^{(0)}|l^{(0)}> \\ <2^{(0)}|l^{(0)}> \\ \vdots \end{pmatrix} \tag{5.2.7}$$

となる．いつものように固有値は，永年方程式

$$\det(\boldsymbol{V} - \Delta^{(1)}\mathbf{1}) = 0 \tag{5.2.8}$$

を解くことにより求められる．この根は全部で g 個ある固有値 $\Delta_l^{(1)}$ を決定する．それらを (5.2.7) に代入することによって，それぞれの l に対して，$<m^{(0)}|l^{(0)}>$ を全体にかかる規格化定数を別にして求めることができる．このように固有値問題を解くことにより，1次のエネルギーのずれと正しいゼロ次の固有ケットが一挙に得られる．$\lambda\to 0$ で得られるゼロ次のケット $|l^{(0)}>$ が，さまざまな $|m^{(0)}>$ の線形結合であり摂動 V を対角化していること，また対角

要素がただちに1次のずれ

$$\Delta_l^{(1)} = \langle l^{(0)} | V | l^{(0)} \rangle \tag{5.2.9}$$

を与えていることに注目しよう．またもし縮退している部分空間が全空間であるならば，このような方法で問題が厳密に解けてしまっていることにも注意しよう．縮退している部分空間に属していない“離れた”非摂動固有ケットの存在は，高次でのみ現われる。――エネルギー固有ケットに関しては1次以上で，エネルギー固有値に関しては2次以上で影響が出る．

表式 (5.2.9) は，縮退のない場合の1次のエネルギーのずれ[(5.1.37)を見よ]とよく似ているが違う点がある．ここで確認すべきことは用いる基底ケットが，縮退している非摂動固有ケットによって張られる部分空間内で，V のゼロでない非対角行列要素を持たないことである．もし V 演算子が，用いている基底ケットの表示で既に対角的なら，V の期待値をとることにより1次のずれはただちに書き下せ，縮退のない場合と同じである．

次に1次のケット方程式を調べよう．再び (5.2.5) を書くと

$$(E_D^{(0)} - H_0) | l^{(1)} \rangle = (V - \Delta_l^{(1)}) | l^{(0)} \rangle \tag{5.2.5$'$}$$

である．こんどは次のような補足的射影演算子 ϕ_D を定義する：

$$\phi_D = 1 - \sum_{m \in D}^{g} | m^{(0)} \rangle \langle m^{(0)} | = \sum_{k \notin D} | k^{(0)} \rangle \langle k^{(0)} |. \tag{5.2.10}$$

この演算子は任意のケットにかかり，そのケットから縮退している部分空間の補空間中にある部分を選び出す．以前述べたように，(5.2.5′) の右辺 $(V - \Delta_l^{(1)}) | l^{(0)} \rangle$ は縮退している部分空間内で成分を持たない．それは (5.2.5′) の両辺に縮退のある非摂動固有ブラの一つである $\langle m^{(0)} |$ をかけると容易に分かる．したがって

$$\phi_D (V - \Delta_l^{(1)}) | l^{(0)} \rangle = (V - \Delta_l^{(1)}) | l^{(0)} \rangle = \phi_D V | l^{(0)} \rangle \tag{5.2.11}$$

となる。逆演算子 $1/(E_D^{(0)} - H_0)$ は ϕ_D と共に用いれば，もはや発散しない．そこで(5.2.5′)を次のように倒置することができる：

$$|l^{(1)}\rangle = \frac{\phi_D}{E_D^{(0)} - H_0} V|l^{(0)}\rangle. \tag{5.2.12}$$

(5.2.10) を用いて具体的に書くと，この式は

$$|l^{(1)}\rangle = \sum_{k\notin D} \frac{|k^{(0)}\rangle V_{kl}}{E_D^{(0)} - E_k^{(0)}} \tag{5.2.13}$$

†（訳注653頁参照）

となる。等式 (5.2.12) は (5.1.39) と類似しているが，和の形をした (5.2.13) 式から除かれているのは $|l^{(0)}\rangle$ ばかりでなく，他のすべての縮退している非摂動ケットであることが異なる．

前に見たように，$|l^{(0)}\rangle$ は全体にかかる規格化定数を別にして分かっている．縮退のない場合と同じように，規格化の約束として

$$\langle l^{(0)}|l\rangle = 1 \tag{5.2.14}$$

を用いると便利である．すると (5.2.3) と (5.2.4) から

$$\lambda\langle l^{(0)}|V|l\rangle = \Delta_l \tag{5.2.15}$$

すなわち

$$\lambda\langle l^{(0)}|V|(|l^{(0)}\rangle + \lambda|l^{(1)}\rangle + \cdots) = \lambda\Delta_l^{(1)} + \lambda^2\Delta_l^{(2)} + \cdots \tag{5.2.16}$$

と書ける．λ-項はちょうど (5.2.9) を再現する．λ^2-項に関しては，[(5.2.12) を用いて]

$$\Delta_l^{(2)} = \langle l^{(0)}|V|l^{(1)}\rangle = \langle l^{(0)}|V\frac{\phi_D}{E_D^{(0)} - H_0}V|l^{(0)}\rangle \tag{5.2.17}$$

が得られる．(5.2.10) を用いて具体的に表わすと，上式は

$$\Delta_l^{(2)} = \sum_{k \notin D} \frac{|V_{kl}|^2}{E_D^{(0)} - E_k^{(0)}} \tag{5.2.18}$$

となる．この和の中で，縮退している非摂動ケットからの寄与がすべて省かれていることに再び注目しよう．

このような手続きは永年方程式 (5.2.8) の根に縮退がなければ有効である．縮退のあるときは，摂動を受けたケットが $\lambda \to 0$ の極限でもどる，縮退のある非摂動ケットの線形結合が何なのかに，あいまいさが残る．逆に，我々の方法が有効であるためには，縮退が摂動の1次で完全に解けなければならない．ここで上級者が挑戦する問題を一つ出そう：縮退が1次で解けなかったなら，すなわち永年方程式のいくつかの根が等しかったならば，どうしたらよいであろうか．（この章末の問 12 を参照）

縮退のあるときの摂動論の基本的手続きを要約しておこう：

1. 縮退している非摂動固有ケットを見分け，摂動行列 V を構成する．g 重縮退のとき，これは $g \times g$ 行列である．
2. 摂動行列を，いつものように適当な永年方程式を解くことにより対角化する．
3. 永年方程式の根は，1次のエネルギーのずれと同じである．V 行列を対角化する基底ケットは，摂動を受けたケットが $\lambda \to 0$ の極限で近づく正しいゼロ次のケットである．
4. 高次の計算には，縮退のないときの対応する摂動論の公式を用いる．ただし和の中では，縮退している部分空間 D の非摂動ケットからの寄与をすべて除外する．

1次のシュタルク効果

縮退のある摂動論の例として，水素原子の励起状態に対する一様な電場の効果を調べよう．よく知られているように，スピンに依存しない純粋なクーロンポテンシャルがあるときのシュレーディンガー理論では，水素原子の

束縛エネルギーは主量子数 n のみによっている．したがって，与えられた n に対して許される l の値は

$$0 \leq l < n \tag{5.2.19}$$

だけあり，基底状態以外はすべて縮退している．特に $n=2$ の準位に対しては，$2s$ という $l=0$ の状態が一つと $2p$ という $l=1\,(m=\pm1,\ 0)$ の状態が三つあり，すべて同一のエネルギー $-e^2/8a_0$ を持っている．一様な電場を z-方向にかけたとき，この摂動演算子は

$$V = -ez|\boldsymbol{E}| \tag{5.2.20}$$

で与えられ，これを次に対角化しなくてはならない．行列要素を通常の (nlm) 基底を用いて詳しく計算する前に，摂動 (5.2.20) はパリティの異なる状態間のみにおいて，すなわち今の場合は $l=1$ と $l=0$ の間のみで，ゼロでない行列要素を持つことに注目しよう．さらに z が階数 1 で球面成分(磁気量子数)ゼロの球面テンソルのようにふるまうことから，行列要素がゼロでないためには m の値は等しくなくてはならない．したがってゼロでない行列要素を持つのは，$2s$ (必然的に $m=0$) と $m=0$ の $2p$ 間のみである．以上により摂動行列を

$$V = \begin{pmatrix} 2s & 2p\ m=0 & 2p\ m=1 & 2p\ m=-1 \\ 0 & \langle 2s|V|2p,m=0\rangle & 0 & 0 \\ \langle 2p,m=0|V|2s\rangle & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{5.2.21}$$

のように表わすことができる．具体的には

$$\begin{aligned} \langle 2s|V|2p,\ m=0\rangle &= \langle 2p,\ m=0|V|2s\rangle \\ &= 3ea_0|\boldsymbol{E}| \end{aligned} \tag{5.2.22}$$

である．この正方行列の左上隅にのみ注意を向ければ十分である．その部分は σ_x 行列とそっくりであり，すぐに答えを書き下せる．エネルギーのずれに対しては

$$\Delta_{\pm}^{(1)} = \pm 3ea_0 \, |\boldsymbol{E}| \tag{5.2.23}$$

が得られる．ここで添字 ± は V を対角化するゼロ次の二つのケット

$$|\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|2s,\ m=0\rangle \pm |2p,\ m=0\rangle) \tag{5.2.24}$$

に関係している．図式的にエネルギー準位を表わすと，図5.1のようになる．

エネルギーのずれは，かけた電場の強さの1次関数であることに注意しよう．**1次のシュタルク効果**という用語はここからきている．エネルギー固有ケット(5.2.24)がパリティ固有状態でなく，したがって $\langle z\rangle$ を具体的に計算してみると容易に分かるように，ゼロでない永久電気双極子モーメントを持てることに注意すれば，この効果の存在がはっきりするであろう．ごく一般的に，異なるパリティ状態の結合として書かれるエネルギー状態はゼロでない永久電気双極子モーメントを持つことができ，これが1次のシュタルク効果をひき起こす．

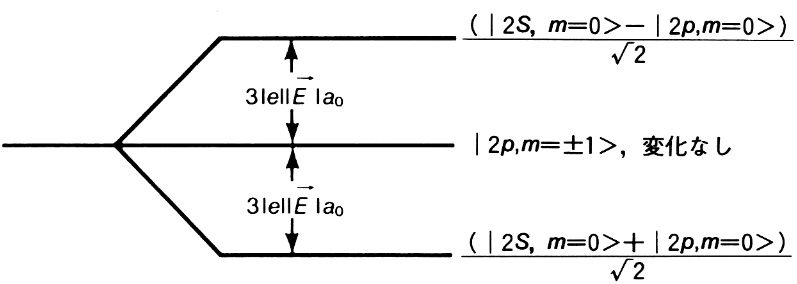


図 5.1. 縮退のある摂動論の例である1次のシュタルク効果のエネルギー準位を示す図．

ここで一つの興味深い疑問がわいてくる．“現実の”水素原子に目を向けると，$2s$ 準位と $2p$ 準位は実際に縮退していない．スピン-軌道相互作用のために次の節で示すように $2p_{3/2}$ と $2p_{1/2}$ とは分離している．また一粒子ディラック理論では残っている $2s_{1/2}$ と $2p_{1/2}$ 準位間の縮退さえも，量子電気力学的効果(ラムシフト)のために解けてしまう．一体，この問題に縮退のある摂動論を適用するのは現実的であろうか．厳密解と比較すると分かるが，摂動の行列要素が，ラムシフトの分裂と較べてずっと大きいとき，エネルギーのずれは実際上すべての場合に対して $|\boldsymbol{E}|$ の 1 次であり，縮退のある摂動論の公式は適用可能である．反対の極限で摂動行列要素がラムシフト分裂に較べて小さいときには，エネルギーのずれは 2 次であり，縮退のない摂動論を適用できる．この章末の問題 13 を見よ．このことが付随的に示しているように，摂動行列要素で定義されるエネルギーのスケールに較べてエネルギー準位がほぼ縮退しているときには，縮退のある摂動論の形式が依然有用である．中間の場合は難かしい．近くにあるすべての準位で張られる空間内で，厳密にハミルトニアンを対角化することを試みるのが安全である．

5.3　水素様原子：微細構造とゼーマン効果

スピン-軌道相互作用と微細構造

この節では水素様原子，すなわち閉殻の外側に 1 個の価電子を持つ原子の原子構造を考察する．ナトリウム(Na)やカリウム(K)のようなアルカリ原子が，この部類に入る．

価電子の受ける中心力(スピンによらない)ポテンシャル $V_c(r)$ は，もはや純粋のクーロン型でない．これは

$$V_c(r) = e\,\phi(r) \tag{5.3.1}$$

に現われる静電ポテンシャル $\phi(r)$ が，もはや電荷 $|e|Z$ の原子核のみによっ

て作られるものでないからである．負に帯電した内殻の雲を考慮に入れなければならない．ここで正確な $\phi(r)$ の形は問題にしない．純粋なクーロンポテンシャルに特徴的な縮退がいまは解け，与えられた n に対しては l の高い状態が高いエネルギーを持つことを注意するだけにする．この物理的理由は，l の高い状態の方が電子雲による斥力を感じ易いという事実にある．

水素様原子のだいたいの構造を決めている $V_c(r)$ を詳細に調べる代りに，微細構造を与えるスピン-軌道 $(\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S})$ 相互作用の効果を議論しよう．この相互作用の存在は，定性的に次のように理解できる．中心力の部分 (5.3.1) のために，価電子は電場

$$\boldsymbol{E} = -\left(\frac{1}{e}\right)\nabla V_c(r) \tag{5.3.2}$$

を受ける．だが速度 $\boldsymbol{v}$ で運動する電荷が電場の下にあると，いつでも

$$\boldsymbol{B}_{\text{eff}} = -\left(\frac{\boldsymbol{v}}{c}\right)\times\boldsymbol{E} \tag{5.3.3}$$

で与えられる有効磁場を“感じる”．電子は

$$\boldsymbol{\mu} = \frac{e\boldsymbol{S}}{m_e c} \tag{5.3.4}$$

で与えられる磁気モーメント $\boldsymbol{\mu}$ を持つので，スピン-軌道ポテンシャル V_{LS} の H への寄与は

$$\begin{aligned} H_{LS} &\overset{?}{=} -\boldsymbol{\mu}\cdot\boldsymbol{B}_{\text{eff}} = \boldsymbol{\mu}\cdot\left(\frac{\boldsymbol{v}}{c}\times\boldsymbol{E}\right) \\ &= \left(\frac{e\boldsymbol{S}}{m_e c}\right)\cdot\left[\frac{\boldsymbol{p}}{m_e c}\times\left(\frac{\boldsymbol{x}}{r}\right)\frac{1}{(-e)}\frac{dV_c}{dr}\right] \\ &= \frac{1}{m_e^2 c^2}\frac{1}{r}\frac{dV_c}{dr}(\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S}) \end{aligned} \tag{5.3.5}$$

のようでないかと思われる．この表式は観測されるスピン-軌道相互作用と比

較してみると，符号は正しいが大きさは因子２だけ大き過ぎることが分かる．これを古典的にスピンの歳差運動（L. H. トーマスの名にちなみトーマス歳差という）により説明することもできるが，その説明には立入らない(例えば Jackson 1975を参照)．単にスピン-軌道相互作用を現象論的に扱い，V_{LS} を(5.3.5)の半分にとる．この食い違いを正しく量子力学的に説明するには，ディラックの（相対論的）電子論の登場が必要である(例えば Sakurai 1967を参照)．

以上の準備により，摂動(5.1節，5.2節の V)として V_{LS} をとり，水素様原子に摂動論を適用することができる．非摂動ハミルトニアン H_0 は

$$H_0 = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} + V_c(r) \tag{5.3.6}$$

にとる．この中心力ポテンシャルはアルカリ原子に対してはもはや純粋のクーロン型でない．H_0 だけとすると基底ケットを選ぶのに次の自由度がある：

$$\begin{aligned}&\text{第1の組：}\quad \boldsymbol{L}^2,\ L_z,\ \boldsymbol{S}^2,\ S_z \text{の固有ケット．}\\&\text{第2の組：}\quad \boldsymbol{L}^2,\ \boldsymbol{S}^2,\ \boldsymbol{J}^2,\ J_z \text{の固有ケット．}\end{aligned} \tag{5.3.7}$$

V_{LS}（または H_{LS}）がない限り，どちらの組も，基底ケットがエネルギー固有ケットでもあるので申し分ない．H_{LS} が加わると（5.3.7）の第２の組を用いた方が，はるかにすぐれている．$\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S}$ は L_z や S_z とは交換しないが，$\boldsymbol{J}^2$ と J_z とは交換するからである．基本的な規則を思い出そう：摂動項を対角化する非摂動ケットを選べ．L_z, S_z の固有ケット [(5.3.7)の第１の組] をこの問題の基底ケットに選んだ者は，知恵が足りないかマゾヒストに違いない．基底ケットとして第１の組から出発し縮退のある摂動論を盲目的に適用していくと，L_z, S_z 表示で書かれた V_{LS} (H_{LS}) 行列を対角化しなければならない．めんどうな計算を沢山したあげく，用いるべきゼロ次の非摂動ケットとして $\boldsymbol{J}^2$，J_z の固有ケットが得られる！

縮退のある摂動論では用いている表示で摂動が既に対角的であるなら，１次のエネルギーのずれを求めるのに単に期待値をとればよい．２成分形の波

動関数は具体的に

$$\psi_{nlm} = R_{nl}(r)\ \mathcal{Y}_l^{j=l\pm 1/2,\,m} \tag{5.3.8}$$

のように書ける．ここで $\mathcal{Y}_l^{j=l\pm 1/2,\,m}$ は3.7節のスピン-角関数[(3.7.64)を見よ]である．1次のずれとして得られるのは

$$\Delta_{nlj} = \frac{1}{2m_e^2c^2}\left\langle \frac{1}{r}\frac{dV_c}{dr}\right\rangle_{nl}\frac{\hbar^2}{2}\begin{Bmatrix} l \\ -(l+1) \end{Bmatrix},\quad \begin{matrix} j=l+\frac{1}{2} \\ j=l-\frac{1}{2} \end{matrix} \tag{5.3.9}$$

$$\left\langle \frac{1}{r}\frac{dV_c}{dr}\right\rangle_{nl} \equiv \int_0^\infty R_{nl}\frac{1}{r}\frac{dV_c}{dr}R_{nl}\,r^2dr$$

である．ここでは m に依存しない恒等式[(3.7.65)を見よ]

$$\int \mathcal{Y}_l^{j=l\pm 1/2,\,m*}\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{L}\mathcal{Y}_l^{j=l\pm 1/2,\,m}\,d\Omega = \frac{1}{2}\left[j(j+1)-l(l+1)-\frac{3}{4}\right]\hbar^2$$
$$= \frac{\hbar^2}{2}\begin{Bmatrix} l \\ -(l+1) \end{Bmatrix}\quad \begin{matrix} j=l+\frac{1}{2} \\ j=l-\frac{1}{2} \end{matrix} \tag{5.3.10}$$

を用いた．等式(5.3.9)は**ランデの間隔則**(Lande's interval rule)と呼ばれている．†

具体的にナトリウム原子を考えよう．ふつうの原子分光学の記号で，基底状態の電子配置は

$$(1s)^2\,(2s)^2\,(2p)^6\,(3s) \tag{5.3.11}$$

と表わせる．内側の10個の電子は，球対称の電子雲を形づくると見られる．興味あるのは11番目の電子の，3s から可能な高いエネルギー状態への励起である．一番近い可能性は，3p への励起である．中心力ポテンシャルは，もはや

† 訳注：多重項の隣り合う成分の準位間隔 $\Delta_{nlj} - \Delta_{nlj-1}$ が j に比例すること．

純粋なクーロン型でないから，いま $3s$ と $3p$ とは分離している．V_{LS} によってもたらされる微細構造とは，$3p$ 内のさらに細かな $3p_{1/2}$ と $3p_{3/2}$ との間の分裂を指す．p の添字は j を意味する．実験では**ナトリウムの *D* 線**と呼ばれる黄色の線が 2 本の接近した線として 1 本は5896Å に他の 1 本は5890Å に観測される．図5.2を見よ．(5.3.9)の動径積分は正だから，$3p_{3/2}$ の方が高いことに注意しよう．

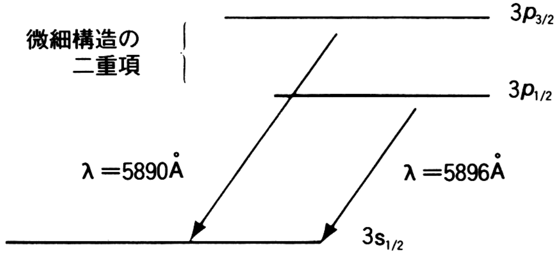


図 5.2.　$3s$，$3p$ の準位を示す図．いま $V_c(r)$ は純粋のクーロンポテンシャルでなく殻内電子のために遮蔽されたクーロンポテンシャルなので，$3s$ と $3p$ の縮退は解けている．さらに V_{LS} が $3p_{1/2}$ と $3p_{3/2}$ の縮退を解く．

微細構造分裂の大きさの程度を評価するために，$Z \simeq 1$ に対しては次元の考察をもとに

$$\left\langle \frac{1}{r}\frac{dV_c}{dr} \right\rangle_{nl} \sim \frac{e^2}{a_0{}^3} \qquad (5.3.12)$$

であることに注意しよう．そうすると微細構造分裂は $(e^2/a_0{}^3)(\hbar/m_e c)^2$ の程度であり，e^2/a_0 の程度のバルマー分裂と比較される．ここで電子の古典半径と，電子のコンプトン波長およびボーア半径が次のように関連していることを思い出すと有用である：

$$\frac{e^2}{m_e c^2} : \frac{\hbar}{m_e c} : a_0 = 1 : 137 : (137)^2. \qquad (5.3.13)$$

ここで

を用いた．したがって典型的な微細構造分裂は，典型的なバルマー分裂と

$$\left(\frac{e^2}{a_0^{\ 3}}\frac{\hbar^2}{m_e^{\ 2}c^2}\right):\left(\frac{e^2}{a_0}\right)=\left(\frac{1}{137}\right)^2:1 \tag{5.3.15}$$

の比率で関連している．微細構造という用語はここに由来している．ところでこれと同程度の大きさの他の効果も存在する．特に展開

$$\sqrt{m_e^{\ 2}c^4+p^2c^2}-m_ec^2\simeq\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m_e}-\frac{\boldsymbol{p}^4}{8m_e^{\ 3}c^2} \tag{5.3.16}$$

から生じる相対論的質量補正は同程度である．

ゼーマン効果

次に議論するのは，一様な磁場中の水素または水素様（1電子）原子の示す**ゼーマン効果**である．電子スピンの影響があるときは，これを異常ゼーマン効果ということもある．まず一様な磁場 $\boldsymbol{B}$ はベクトルポテンシャル

$$\boldsymbol{A}=\frac{1}{2}(\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{r}) \tag{5.3.17}$$

から導かれることを思い出そう．$\boldsymbol{B}$ が z-軸の正方向にあるとき ($\boldsymbol{B}=B\hat{\boldsymbol{z}}$) は

$$\boldsymbol{A}=-\frac{1}{2}(B\,y\hat{\boldsymbol{x}}-B\,x\hat{\mathbf{y}}) \tag{5.3.18}$$

とすれば十分である．B は $|\boldsymbol{B}|$ を表わす．スピン項を別にすれば，相互作用ハミルトニアンは

$$\boldsymbol{p}\rightarrow\boldsymbol{p}-\frac{e\boldsymbol{A}}{c} \tag{5.3.19}$$

という置き換えにより作られる．したがって

$$H=\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m_e}+V_c(r)-\frac{e}{2m_ec}(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{A}+\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{p})+\frac{e^2\boldsymbol{A}^2}{2m_ec^2} \tag{5.3.20}$$

となる．ここで

$$< \boldsymbol{x}' \mid \boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}) \mid > = -i\hbar\nabla'\cdot[\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}')<\boldsymbol{x}'\mid>]$$
$$= <\boldsymbol{x}' \mid \boldsymbol{A}(\boldsymbol{x})\cdot\boldsymbol{p} \mid > + <\boldsymbol{x}'\mid>[-i\hbar\nabla'\cdot\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}')] \qquad (5.3.21)$$

であるから，(5.3.18)のベクトルポテンシャルの場合のように

$$\nabla\cdot\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}) = 0 \qquad (5.3.22)$$

ならばいつでも，$\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{A}$を$\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{p}$で置き換えることが正当化できる．さらに

$$\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{p} = |\boldsymbol{B}|\left(-\frac{1}{2}yp_x + \frac{1}{2}xp_y\right)$$
$$= \frac{1}{2}|\boldsymbol{B}|L_z \qquad (5.3.23)$$

および

$$\boldsymbol{A}^2 = \frac{1}{4}|\boldsymbol{B}|^2(x^2+y^2) \qquad (5.3.24)$$

を用いると (5.3.20) の代りに

$$H = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m_e} + V_c(r) - \frac{e}{2m_ec}|\boldsymbol{B}|L_z + \frac{e^2}{8m_ec^2}|\boldsymbol{B}|^2(x^2+y^2) \qquad (5.3.25)$$

が得られる。この式にはスピン磁気モーメント相互作用

$$-\boldsymbol{\mu}\cdot\boldsymbol{B} = \frac{-e}{m_ec}\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{B} = \frac{-e}{m_ec}|\boldsymbol{B}|S_z \qquad (5.3.26)$$

を付け加えることができる．２次の項 $|\boldsymbol{B}|^2(x^2+y^2)$ は一電子原子では重要でない．このような項は $L_z^{(全体)}$ と $S_z^{(全体)}$ が共にゼロであるヘリウム原子の基底状態に対しては重要である．読者はこの章末の問題 18 と 19 で，反磁性帯磁率を計算するときこの問題に再会するであろう．

要約すると，2次の項を落とすと全ハミルトニアンは次の3項から成る：

$$H_0 = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m_e} + V_c(r) \tag{5.3.27a}$$

$$H_{LS} = \frac{1}{2m_e^2c^2}\frac{1}{r}\frac{dV_c(r)}{dr}\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S} \tag{5.3.27b}$$

$$H_B = \frac{-e|\boldsymbol{B}|}{2m_ec}(L_z + 2S_z) \tag{5.3.27c}$$

S_zの前にある因子2に注意しよう．これは電子のg-因子が2であることの反映である．

H_Bを小さな摂動として取り扱うことにしよう．基底ケットとして$H_0 + H_{LS}$の固有ケット —— $\boldsymbol{J}^2$の固有ケット —— を用いてH_Bの効果を調べることができる．1次のエネルギーのずれは

$$L_z + 2S_z = J_z + S_z \tag{5.3.28}$$

に着目して

$$-\frac{e|\boldsymbol{B}|}{2m_ec} < J_z + S_z >_{j=l\pm1/2,\, m} \tag{5.3.29}$$

と表わせる．J_zの期待値は直ちに$m\hbar$を与える．$< S_z >$に関しては，まず

$$\begin{aligned} |j = l\pm\frac{1}{2},\ m> &= \pm\sqrt{\frac{l\pm m+\frac{1}{2}}{2l+1}}\,|m_l = m-\frac{1}{2},\ m_s = \frac{1}{2}> \\ &\quad +\sqrt{\frac{l\mp m+\frac{1}{2}}{2l+1}}\,|m_l = m+\frac{1}{2},\ m_s = -\frac{1}{2}> \end{aligned} \tag{5.3.30}$$

であることを思い出そう．[(3.7.63)を参照]．するとS_zの期待値は容易に計

算できる：

$$\begin{aligned}<S_Z>_{j=l\pm1/2,\, m} &= \frac{\hbar}{2}(|c_+|^2 - |c_-|^2)\\ &= \frac{\hbar}{2}\frac{1}{(2l+1)}\left[\left(l\pm m+\frac{1}{2}\right)-\left(l\mp m+\frac{1}{2}\right)\right] = \pm\frac{m\hbar}{2l+1}.\end{aligned} \tag{5.3.31}$$

こうして（磁場 $\boldsymbol{B}$ による）エネルギーのずれに対するランデの公式

$$\Delta E_B = \frac{-e\hbar B}{2m_e c}\, m\left[1\pm\frac{1}{2l+1}\right] \tag{5.3.32}$$

が得られる．［訳注：(5.3.32) 式右辺のかっこ内がランデの g-因子である．］

エネルギーのずれ (5.3.32) は m に比例していることが分かる．この物理的由来を理解するために，(5.3.31)を導く別法を紹介しよう．S_Zの期待値が3.10節の射影定理を用いても得られることを思い出すと［(3.10.45)を見よ］

$$\begin{aligned}<S_Z>_{j=l\pm1/2,\, m} &= \left[<\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{J}>_{j=l\pm1/2}\right]\frac{m\hbar}{\hbar^2 j(j+1)}\\ &= \frac{m<\boldsymbol{J}^2+\boldsymbol{S}^2-\boldsymbol{L}^2>_{j=l\pm1/2}}{2\hbar\, j(j+1)}\\ &= m\hbar\left[\frac{\left(l\pm\frac{1}{2}\right)\left(l\pm\frac{1}{2}+1\right)+\frac{3}{4}-l(l+1)}{2\left(l\pm\frac{1}{2}\right)\left(l\pm\frac{1}{2}+1\right)}\right]\\ &= \pm\frac{m\hbar}{2l+1}\end{aligned} \tag{5.3.33}$$

が得られる．これは(5.3.31)と完全に一致している．

今までの議論で磁場は小さな摂動として取り扱われてきた．ここで逆の極限――**パッシェン-バックの極限**――を考えよう．すなわち磁場は非常に強く，H_B の効果が H_{LS} の効果よりはるかに重要な場合である．H_{LS} は後から小さな摂動として付け加えることにする．$H_0 + H_B$ だけがあるとき，よい量子数は L_Z と S_Z である．強磁場 $\boldsymbol{B}$ によって球対称性は完全に壊れているので，

J^2 でさえよい量子数でない．磁場は空間内に特別な方向，z-方向を選んでいる．残されたのは円柱対称——すなわち z-軸のまわりの回転に関する不変性——だけである．そこで L_Z，S_Z の固有ケット $|l,\ s=\frac{1}{2};\ m_l,\ m_s>$ を基底ケットとして用いよう．主要項 H_B の効果は容易に計算できる：

$$< H_B >_{m_l m_s} = \frac{-e|\boldsymbol{B}|\hbar}{2m_e c}(m_l + 2m_s). \qquad (5.3.34)$$

H_0 の下でもともと持っていた m_l と m_s の $2(2l+1)$ 重縮退[(5.3.27a) を見よ]は，H_Bによって解け，残った縮退は$(m_l)+(2m_S)$が同じ値，すなわち $(m_l)+(1)$ と $(m_l+2)+(-1)$ の二つの状態だけになっている．一方，摂動項 $\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S}$ の期待値は明らかに $|m_l,\ m_s>$ に関して計算しなければならない：

$$\begin{aligned} < \boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S} > &= < L_Z S_Z + \frac{1}{2}(L_+S_- + L_-S_+) >_{m_l m_s} \\ &= \hbar^2 m_l m_s \end{aligned} \qquad (5.3.35)$$

ここで

$$<L_\pm>_{m_l} = 0, \quad <S_\pm>_{m_s} = 0 \qquad (5.3.36)$$

を用いた．以上により

$$< H_{LS} >_{m_l m_s} = \frac{\hbar^2 m_l m_s}{2m_e^2 c^2}\left\langle \frac{1}{r}\frac{dV_c}{dr} \right\rangle \qquad (5.3.37)$$

が得られる．

多くの初等的な教科書には，弱磁場の結果(5.3.32)と強磁場の結果(5.3.34)とが図解してあるが，ここでは省略する．結果を表5.1に簡単に要約するが，表で弱い $\boldsymbol{B}$，強い $\boldsymbol{B}$ とわけたのは，$\boldsymbol{B}$ に対応するゼーマン・エネルギーの大きさ $e\hbar B/2m_e c$ を，スピン-軌道エネルギー$(1/137)^2 e^2/a_0$ と比較して“分類した”ものである．この表で大体よいとは，単に主要でない相互作用

が無視できる限りよい量子数であるという意味である.

表 5.1

	主な相互作用	大体よい	よくない	常によい
弱い $\boldsymbol{B}$	H_{LS}	$\boldsymbol{J}^2$(または $\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S}$)	L_z, S_z*	$\boldsymbol{L}^2$, $\boldsymbol{S}^2$, J_z
強い $\boldsymbol{B}$	H_B	L_z, S_z	$\boldsymbol{J}^2$(または $\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S}$)	

*例外は伸び切った配置，例えば $P_{3/2}$ で $m=\pm\frac{3}{2}$ である．このとき L_z と S_z は共によい量子数となる．磁気量子数 J_z, $m=m_l+m_s$ が一意的に満足できるからである.

特に p 電子 $l=1$ ($p_{3/2}$, $p_{1/2}$) の準位の構造を見よう．$\boldsymbol{B}$ が弱い場合にはエネルギーのずれは $\boldsymbol{B}$ に 1 次で，傾きは

$$m\left[1\pm\left(\frac{1}{2l+1}\right)\right]$$

で決まる．ここで $\boldsymbol{B}$ を増加させると，同じ m の値をもつ状態間――例えば $m=\pm\frac{1}{2}$ の $p_{3/2}$ と $m=\pm\frac{1}{2}$ の $p_{1/2}$ の間 ―― で混合が可能となる．これに関連して，H_B [(5.3.27c)] に現われる演算子 L_z+2S_z が球面成分 $q=0$ の 1 階のテンソル演算子 $T^{(k=1)}_{q=0}$ であることに注意しよう．$\boldsymbol{B}$ が中間の大きさの領域では，期待値に対する (5.3.32) や (5.3.34) のような単純な式は使えない．実際に即した 2 × 2 行列を対角化することが必要である(Gottfried 1966, pp. 371-73)．強い磁場 $\boldsymbol{B}$ の極限ではエネルギーは再び $|\boldsymbol{B}|$ に比例する. (5.3.34)から分かるように，その傾きは m_l+2m_s によって決まる.

ファン・デル・ワールスの相互作用

レイリー・シュレーディンガーの摂動論の重要ですばらしい応用の一つは，基底状態にある二つの水素原子間の長距離相互作用，すなわちファン・デル・ワールス力を計算することである．遠く r だけ離れた 2 原子間に働くエネルギーが引力的で，r^{-6} のように変化することを示すのは易しい.

二つの水素原子の陽子を距離 r だけ(z-軸に沿って)離して固定し，第一の陽子から近傍の電子までのベクトルを $\boldsymbol{r}_1$，第二の陽子から近傍の電子までのベクトルを $\boldsymbol{r}_2$ としたと考えよう．図5.3を見よ．するとハミルトニアン H は

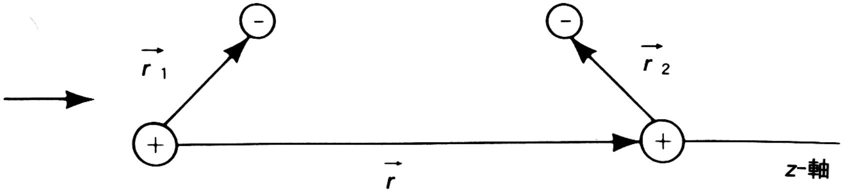


図 5.3. 定距離 r だけ陽子(＋)が離れている二つの水素原子．電子(－)はそれぞれの陽子から $\boldsymbol{r}_i$ だけ離れている．

$$H = H_0 + V$$

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m}(\nabla_1{}^2 + \nabla_2{}^2) - \frac{e^2}{r_1} - \frac{e^2}{r_2} \tag{5.3.38}$$

$$V = \frac{e^2}{r} + \frac{e^2}{|\boldsymbol{r}+\boldsymbol{r}_2-\boldsymbol{r}_1|} - \frac{e^2}{|\boldsymbol{r}+\boldsymbol{r}_2|} - \frac{e^2}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_1|}$$

のように書ける．H_0 の最低エネルギーの解は単に，相互作用をしていない水素原子の基底状態の波動関数の積

$$U_0^{(0)} = U_{100}^{(0)}(\boldsymbol{r}_1)\,U_{100}^{(0)}(\boldsymbol{r}_2) \tag{5.3.39}$$

である．ここで大きな r ($\gg$ ボーア半径 a_0) に対して摂動 V を $\boldsymbol{r}_i/r$ の級数に展開すると

$$V = \frac{e^2}{r^3}(x_1x_2 + y_1y_2 - 2z_1z_2) + O\left(\frac{1}{r^4}\right) + \cdots\cdots \tag{5.3.40}$$

が得られる．(5.3.40)中の最低次である r^{-3} 次の項は，$\boldsymbol{r}$ だけ離れた二つ電気

双極子 $e\boldsymbol{r}_1$ と $e\boldsymbol{r}_2$ の相互作用に対応する．高次の項は高次の多重極相互作用を表わし，Vの各項はそれぞれの水素原子に関する球面調和関数 $Y_{l_i}{}^{m}(l_i>0)$ を含む．したがって(5.3.40)中の各項に対して１次摂動のエネルギー行列要素は，(5.3.39)の基底状態波動関数 $U_0^{(0)}$ が $l_i=0$（また l と m がゼロでないとき $\int d\Omega Y_l^m(\Omega)=0$）であるので，$V_{00}\simeq 0$ となる．２次の摂動

$$E^{(2)}(r)=\frac{e^4}{r^6}\sum_{k\neq 0}\frac{|\langle k^{(0)}|x_1x_2+y_1y_2-2z_1z_2|0^{(0)}\rangle|^2}{E_0^{(0)}-E_k^{(0)}} \qquad (5.3.41)$$

がゼロになることはない．すぐに分かるように，この相互作用は $1/r^6$ で変化し，$E_k^{(0)}>E_0^{(0)}$ により負である．$1/r^6$ の長距離引力であるファン・デル・ワールス・ポテンシャルは，基底状態にある二つの原子間相互作用の一般的性質である．*

5.4 変 分 法

いうまでもなく前節で展開した摂動論は，扱う系と十分に似たハミルトニアンを持つ系の厳密解を既に知っていなければ，使うことができない．これから議論する変分法は，そのような厳密解が利用できないときに基底状態のエネルギー E_0 を推算するのに，非常に有用である．

基底状態のエネルギー E_0を，“試行ケット” $|\tilde{0}>$ を導入して推測することを試みよう．この試行ケットは，本当の基底状態ケット $|0>$ に似せて作られたものである。このためにまず非常に重要な一つの定理を証明しておこう．$\overline{H}$ を

$$\overline{H}\equiv\frac{<\tilde{0}|H|\tilde{0}>}{<\tilde{0}|\tilde{0}>} \qquad (5.4.1)$$

* Schiff（1968）pp. 261-263の取扱いを参照．そこでは（5.3.41）と変分計算とから，ファン・デル・ワールス・ポテンシャルの大きさの下限と上限が与えられている．Schiff の p. 263にある遅延効果に関する一番目の脚注にも注目せよ．

のように定義する．これは $|\tilde{0}>$ が規格化されていないときにも用いられる形である．次のことが証明できる．

定 理

$$\overline{H} \geq E_0. \tag{5.4.2}$$

これは E_0 の上限が，種々の $|\tilde{0}>$ を考えることにより得られることを意味している．この証明はただちにできる．

証 明 ハミルトニアン H のエネルギー固有ケットが知られていなくても，$|\tilde{0}>$ は

$$|\tilde{0}> = \sum_{k=0}^{\infty} |k><k|\tilde{0}> \tag{5.4.3}$$

のように展開できると考えられる．ここで $|k>$ は H の厳密なエネルギー固有ケット

$$H|k> = E_k|k> \tag{5.4.4}$$

である．定理 (5.4.2) は (5.4.1) の $\overline{H}$ を計算する際に，$E_k = E_k - E_0 + E_0$ を用いると導ける．すなわち

$$\overline{H} = \frac{\sum_{k=0}^{\infty} |<k|\tilde{0}>|^2 E_k}{\sum_{k=0} |<k|\tilde{0}>|^2} \tag{5.4.5a}$$

$$= \frac{\sum_{k=1}^{\infty} |<k|\tilde{0}>|^2 (E_k - E_0)}{\sum_{k=0} |<k|\tilde{0}>|^2} + E_0 \tag{5.4.5b}$$

$$\geq E_0 \tag{5.4.5c}$$

である．ここで (5.4.5b) の第一項の和の中にある $E_k - E_0$ が必ず正であるこ

とを用いた．このことから明らかに，(5.4.2)の等号は $|\tilde{0}\rangle$ が厳密に $|0\rangle$ と一致するときのみ，すなわち係数 $\langle k|\tilde{0}\rangle$ が $k \neq 0$ に対してすべてゼロになるときのみ成立することが分かる．　□

定理 (5.4.2) は $\overline{H}$ が真の基底状態のエネルギーの上限を与えるので，非常に有効である．その上，試行関数が比較的まずくても，基底状態のエネルギーはかなりよく推算できる．その理由は

$$\langle k|\tilde{0}\rangle \sim 0(\varepsilon) \qquad k \neq 0 \text{に対して} \tag{5.4.6}$$

とすると，(5.4.5)から

$$\overline{H} - E_0 \sim 0(\varepsilon^2) \tag{5.4.7}$$

となるからである．この一例をすぐ後に述べる．もちろんこの定理は $\overline{H}$ と E_0 との相違に関して，何も教えてくれない．$\overline{H}$ が E_0 より大きい(または等しい)ことが分かっただけである．

この定理を別の言葉で述べると，$|\tilde{0}\rangle$ が $|0\rangle$ と一致するとき変化

$$|\tilde{0}\rangle \to |\tilde{0}\rangle + \delta|\tilde{0}\rangle \tag{5.4.8}$$

に対して $\overline{H}$ が停留値をとる，すなわち $\delta\overline{H} = 0$ であるということになる．この意味は (5.4.5) 中の $|\tilde{0}\rangle$ の代りに $|0\rangle + \delta|\tilde{0}\rangle$ を用い $\overline{H}$ を計算すれば，真の基底状態エネルギーを推算する際に生じる誤差には $\delta|\tilde{0}\rangle$ が $(\delta|\tilde{0}\rangle)^2$ のオーダーで含まれるということである．

変分法それ自体は，基底状態のエネルギーを推算するのにどのような変分ケットを用いたらよいかに関し，何も述べていない．そこでしばしば物理的直観——例えば波動関数の遠距離での漸近形——に訴えることになる．実際に行うことは，試行ケットを一個以上のパラメータ λ_1，λ_2，……により特徴づけ，$\overline{H}$ を λ_1，λ_2……の関数として計算する．次に $\overline{H}$ を以下の手順により極小にする．　(1) パラメータに関する導関数をすべてゼロにする．すなわち

$$\frac{\partial\overline{H}}{\partial\lambda_1}=0, \quad \frac{\partial\overline{H}}{\partial\lambda_2}=0, \cdots \tag{5.4.9}$$

とする. (2) その時の λ_1, λ_2……の値を決める. (3) それらの値を $\overline{H}$ の表式に再び代入する.

既に試行ケットの波動関数が, 基底状態の厳密な波動関数と同じ関数形をしているときは, もちろんこの方法で真の基底状態のエネルギー固有関数が得られる. 例えば先見の明のある人が, 水素原子の基底状態の波動関数を

$$\langle \boldsymbol{x}|\tilde{0}\rangle \propto e^{-r/a} \tag{5.4.10}$$

の形に違いないと推量したとしよう. ここで a は変化させるパラメータと見なしておく. すると $\overline{H}$ を(5.4.10)を用いて極小にして, 正しい基底状態のエネルギー $-e^2/2a_0$ が見出される. 極小になるのは a がボーア半径 a_0 に一致するときであるのは, 驚くべきことでない.

第2の例として

$$V=\begin{cases} 0, & |x|<a \text{ に対して} \\ \infty, & |x|>a \text{ に対して} \end{cases} \tag{5.4.11}$$

で定義される無限に深い井戸(1次元の箱)の問題の基底状態を推算することを試みよう. もちろんこの厳密解はよく知られている:

$$\langle x|0\rangle=\frac{1}{\sqrt{a}}\cos\left(\frac{\pi x}{2a}\right), \qquad E_0=\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)\left(\frac{\pi^2}{4a^2}\right). \tag{5.4.12}$$

しかし仮にこの答を知らなかったとしてみよう. 明らかに, 波動関数は $x=\pm a$ でゼロでなければならない. さらに基底状態では, 波動関数が波を打つことはできない. この二つの要請を満たす最も簡単な解析関数は, $x=\pm a$ を通る放物線である:

$$<x|\tilde{0}> = a^2 - x^2. \tag{5.4.13}$$

$|\tilde{0}>$ をわざわざ規格化することはしていない．ここには変分パラメータがない．$\overline{H}$ の計算は次のようにできる：

$$\overline{H} = \frac{\left(\dfrac{-\hbar^2}{2m}\right)\displaystyle\int_{-a}^{a}(a^2-x^2)\frac{d^2}{dx^2}(a^2-x^2)dx}{\displaystyle\int_{-a}^{a}(a^2-x^2)^2dx}$$

$$= \left(\frac{10}{\pi^2}\right)\left(\frac{\pi^2\hbar^2}{8a^2m}\right) \simeq 1.0132E_0. \tag{5.4.14}$$

この単純な試行関数を用いて，真の基底状態エネルギーに誤差1.3%まで迫れることは，注目に値する．

さらに複雑な試行関数を用いると，もっとよい結果が得られる．λ を変分パラメータと見なして，試みに

$$<x|\tilde{0}> = |a|^\lambda - |x|^\lambda \tag{5.4.15}$$

としよう．単純な代数計算により

$$\overline{H} = \left[\frac{(\lambda+1)(2\lambda+1)}{2\lambda-1}\right]\left(\frac{\hbar^2}{4ma^2}\right) \tag{5.4.16}$$

が得られるが，これは先に考えた $\lambda=2$（放物線）とあまり違わない

$$\lambda = \frac{1+\sqrt{6}}{2} \simeq 1.72 \tag{5.4.17}$$

で最小値をとる．その値は

$$\overline{H}_{\min} = \left(\frac{5+2\sqrt{6}}{\pi^2}\right)E_0 \simeq 1.00298E_0 \tag{5.4.18}$$

である．つまり(5.4.15)を用いる変分法は，0.3％以内で正確な基底状態エネ

ルギーを与える．用いた試行関数の簡単さを考慮すると，これはすばらしい結果である．

この試行関数は真の基底状態波動関数に，どの程度似ているであろうか．重なり積分 $<0|\tilde{0}>$ を具体的に計算しなくても，この問に答えられることは面白い．$|\tilde{0}>$ が規格化されているとすると［(5.4.1)〜(5.4.4)から］

$$\overline{H}_{\min} = \sum_{k=0} |<k|\tilde{0}>|^2 E_k$$
$$\geq |<0|\tilde{0}>|^2 E_0 + 9E_0(1-|<0|\tilde{0}>|^2) \quad (5.4.19)$$

が得られる．この式の $9E_0$ は第2励起状態のエネルギーである．第1励起状態($k=1$)は，パリティ保存則により寄与しない．$|<0|\tilde{0}>|$ について解き (5.4.18) を用いると

$$|<0|\tilde{0}>|^2 \geq \frac{9E_0 - \overline{H}_{\min}}{8E_0} = 0.99963 \quad (5.4.20)$$

となる．1からのずれは，$|0>$ と垂直方向の $|\tilde{0}>$ の成分を特徴づけている．“角度” θ を

$$<0|\tilde{0}> = \cos\theta \quad (5.4.21)$$

で定義して用いると，(5.4.20)は

$$\theta \lesssim 1.1^\circ \quad (5.4.22)$$

に対応し，$|0>$ と $|\tilde{0}>$ はほぼ“平行である”．

変分法の初期の応用の一つは，ヘリウム原子の基底状態のエネルギーの計算であった．これは6.1節で論議する．また，第1励起状態のエネルギーを推算するのに変分法を用いることもできる．必要なことは，基底状態の波動関数――分かっていれば厳密なものでもよいし，また変分法で得られた近似的なものでもよい――と直交する試行ケットを用いることである．

5.5　時間に依存するポテンシャル：相互作用表示

問題の設定

今まで本書では，時間をあからさまに含まないハミルトニアンを扱ってきた．しかし自然界には，時間に依存する重要な量子力学系が沢山ある．この章の残りの部分で，ポテンシャルが時間に依存する場合を扱う方法を示す．

二つの部分に分けられるハミルトニアン

$$H = H_0 + V(t) \tag{5.5.1}$$

を考える．この中で H_0 は時間をあらわに含まない．$V(t)=0$ とした問題は解けていて，次式で定義されるエネルギー固有ケット $|n\rangle$ とエネルギー固有値 E_n が完全に分かっている*と仮定する：

$$H_0|n\rangle = E_n|n\rangle. \tag{5.5.2}$$

H_0 のエネルギー固有状態のただ一つ——例えば $|i\rangle$ ——を系が初め占めていた場合のことを考えよう．しかし時間が経つにつれ，$|i\rangle$ 以外の状態をも系はとるようになる．それは $V(t)\neq 0$ なので我々はもはや“定常的な”問題を扱っていないからである．H それ自身が時間を含むとき，時間発展の演算子はもう $e^{-iHt/\hbar}$ のように簡単でない．ごく一般的にいって，時間に依存するポテンシャル $V(t)$ は，$|i\rangle$ 以外の状態への遷移を起こすことができる．我々の基本的な問は，系が $n\neq i$ の $|n\rangle$ に見出される確率が時間の関数としてどう表わされるかということである．

全ハミルトニアンを H_0 と $V(t)$ の和とするときもっと一般的に，任意の状態ケットが時間につれてどのように変化するかを問題にしてもよい．はじめ $t=0$ で物理系の状態ケットが

---

*　(5.5.2) では $|n^{(0)}\rangle$，$E_n^{(0)}$ といった記号をもう使わないことにする．

$$|\alpha\rangle = \sum_n c_n(0)|n\rangle \tag{5.5.3}$$

で与えられたと仮定する．目標は $t>0$ に対して

$$|\alpha, t_0 = 0 ; t\rangle = \sum_n c_n(t) e^{-iE_n t/\hbar}|n\rangle \tag{5.5.4}$$

を満たす $c_n(t)$ を見い出すことである．この式の左辺のケットは，$t=0$ で状態ケットが $|\alpha\rangle$ であることが分かっている物理系の，t における状態ケットをシュレーディンガー表示で表わす．

鋭い読者は，(5.5.4)中で $|n\rangle$ の係数の時間依存性を分離している仕方に，気付いたことであろう．因子 $e^{-iE_n t/\hbar}$ は，たとえ V がなくても存在する．時間依存性をこう書いておくと，$c_n(t)$ の時間発展がもっぱら $V(t)$ の存在によるものであることがはっきりする．仮に V がゼロだったとすると，$c_n(t)$ は $c_n(0)$ に恒等的に等しくなり，したがって t に依存しないであろう．すぐに分かるように，こう分離しておくと $c_n(t)$ が比較的簡単な微分方程式を満足するので便利である．$|n\rangle$ を見い出す確率は，$|c_n(t)|^2$を計算すると分かる．

相互作用表示

$c_n(t)$ に対する微分方程式を議論する前に，相互作用表示を議論する．状態ケットが $t=t_0$で $|\alpha\rangle$ に一致する物理系があるとしよう．ここで t_0 はふつうゼロにとる．t_0 よりあとの時刻 t での状態ケットを，シュレーディンガー表示で $|\alpha, t_0, ; t\rangle_S$ と記す．ここで添字 S は，シュレーディンガー表示の状態ケットを扱っていることの覚えにつけている．

次に

$$|\alpha, t_0 ; t\rangle_I = e^{iH_0 t/\hbar}|\alpha, t_0 ; t\rangle_S \tag{5.5.5}$$

を定義する．ここで $|\rangle_I$ は，同じ物理的状況を**相互作用表示**で表現している状態ケットを表わす．$t=0$では $|\rangle_I$ は明らかに $|\rangle_S$ と一致する．演算子(観

測量を表わす)に対しては，相互作用表示の観測量を

$$A_I \equiv e^{iH_0t/\hbar} A_S e^{-iH_0t/\hbar} \tag{5.5.6}$$

で定義する．特に

$$V_I = e^{iH_0t/\hbar} V e^{-iH_0t/\hbar} \tag{5.5.7}$$

とするが，この添字のない V はシュレーディンガー表示の，時間に依存するポテンシャルである．読者はここで，シュレーディンガー表示とハイゼンベルグ表示の関係を思い出すであろう：

$$|\alpha>_H = e^{+iHt/\hbar}|\alpha, t_0 = 0\,;\, t_0>_S \tag{5.5.8}$$

$$A_H = e^{iHt/\hbar} A_S\, e^{-iHt/\hbar}. \tag{5.5.9}$$

一方を(5.5.8)，(5.5.9)とし，他方を(5.5.5)，(5.5.6)としたときの基本的な差異は，指数関数の中に H_0 ではなく H が入っていることである．

次に相互作用表示の状態ケットの時間変化を特徴づける，基礎的な微分方程式を導こう．(5.5.1)で与えられる H 全体を含む(5.5.5)の時間微分をとる：

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\alpha, t_0\,;\, t>_I &= i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left(e^{iH_0t/\hbar}|\alpha, t_0\,;\, t>_S\right) \\ &= -H_0e^{iH_0t/\hbar}|\alpha, t_0\,;\, t>_S + e^{iH_0t/\hbar}(H_0 + V)\,|\,\alpha, t_0\,;\, t>_S \\ &= e^{iH_0t/\hbar} V e^{-iH_0t/\hbar} e^{iH_0t/\hbar}|\alpha, t_0\,;\, t>_S. \end{aligned} \tag{5.5.10}$$

これより

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\alpha, t_0\,;\, t>_I = V_I|\alpha, t_0\,;\, t>_I \tag{5.5.11}$$

が成り立つことが分かる．これは全体の H を V_I で置き換えたシュレーディンガー方程式と似た式である．いい換えれば，$|\alpha, t_0\,;\, t>_I$ はもし V_I が無いと

きには時間変化しないケットである．また観測量 A（シュレーディンガー表示で時間 t をあらわに含まないとする）に対して

$$\frac{dA_I}{dt}=\frac{1}{i\hbar}[A_I,\ H_0] \tag{5.5.12}$$

を示すことができる．これはハイゼンベルグ方程式と似ているが，H が H_0 に置きかわっている．

いろいろな点で相互作用表示（ディラック表示ともいう）は，シュレーディンガー表示とハイゼンベルグ表示の中間である．これは表 5.2 からも明らかであろう．

表 5.2

	ハイゼンベルク表示	相互作用表示	シュレーディンガー表示
状態ケット	変化なし	V_I で決まる時間発展	H で決まる時間発展
観測量	H で決まる時間発展	H_0 で決まる時間発展	変化なし

相互作用表示でも，やはり $|n\rangle$ を基底ケットとして用いよう．そして $|\rangle_I$ を次のように展開する：

$$|\alpha,\ t_0\,;\ t\rangle_I=\sum_n c_n(t)|n\rangle. \tag{5.5.13}$$

t_0 をゼロとしておくと，ここに現われた $c_n(t)$ は以前(5.5.4)で導入した $c_n(t)$ と同じであることが，(5.5.4) の両辺に $e^{+iH_0t/\hbar}$ をかけ(5.5.2)を用いると簡単に確かめられる．

以上により $c_n(t)$ に対する微分方程式を書くことができる．(5.5.11) の両辺に左から $\langle n|$ をかけると

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\langle n|\alpha,\ t_0\,;\ t\rangle_I=\sum_m\langle n|V_I|m\rangle\langle m|\alpha,\ t_0\,;\ t\rangle_I \tag{5.5.14}$$

が得られる．この式は

$$\langle n|e^{iH_0t/\hbar}V(t)e^{-iH_0t/\hbar}|m\rangle = V_{nm}(t)e^{i(E_n-E_m)t/\hbar}$$

と，(5.5.13)から自明な

$$c_n(t) = \langle n|\alpha, t_0; t\rangle_I$$

を用いて

$$i\hbar\frac{d}{dt}c_n(t) = \sum_m V_{nm}e^{i\omega_{nm}t}c_m(t) \tag{5.5.15}$$

のようにも表わせる．ここで

$$\omega_{nm} = \frac{E_n - E_m}{\hbar} = -\omega_{mn} \tag{5.5.16}$$

である．具体的に書くと

$$i\hbar\begin{pmatrix}\dot{c}_1\\ \dot{c}_2\\ \dot{c}_3\\ \vdots\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}V_{11} & V_{12}e^{i\omega_{12}t} & & \cdots\\ V_{21}e^{i\omega_{21}t} & V_{22} & & \cdots\\ & & V_{33} & \\ \vdots & \vdots & & \ddots\end{pmatrix}\begin{pmatrix}c_1\\ c_2\\ c_3\\ \vdots\end{pmatrix} \tag{5.5.17}$$

となる．この式は系が $|n\rangle$ に見い出される確率を t の関数として求めるために解かなければならない，基本的な連立微分方程式である．

時間に依存する2準位問題：核磁気共鳴やメーザーなど

時間に依存するポテンシャルを持つ厳密に解ける問題は稀にしかない．多くの場合，連立微分方程式（5.5.17）を解くのには摂動展開に頼らなければならない．これは次の節で議論する．しかし実際上大変重要でしかも厳密に解

ける問題が一つある．——正弦的振動ポテンシャルを持つ2準位問題である．

この問題は

$$H_0 = E_1|1\rangle\langle 1| + E_2|2\rangle\langle 2| \ , \quad (E_2 > E_1)$$
$$V(t) = \gamma e^{i\omega t}|1\rangle\langle 2| + \gamma e^{-i\omega t}|2\rangle\langle 1| \tag{5.5.18}$$

で定義される．γ と ω は正の実数である．(5.5.14)と(5.5.15)にあわせると

$$V_{12} = V_{21}{}^* = \gamma e^{i\omega t}$$
$$V_{11} = V_{22} = 0 \tag{5.5.19}$$

である．このように H_0 の二つのエネルギー固有状態を結ぶ，時間に依存するポテンシャルがある．すなわち2準位間の遷移 $|1\rangle \rightleftarrows |2\rangle$ がありうる．

この問題では厳密解が利用できる．初め，$t=0$で低い方の準位のみが占められているとすると

$$c_1(0) = 1, \quad c_2(0) = 0 \tag{5.5.20}$$

であるが，系がその後2準位状態のそれぞれに見い出される確率は

$$|c_2(t)|^2 = \frac{\gamma^2/\hbar^2}{\gamma^2/\hbar^2 + (\omega-\omega_{21})^2/4}\sin^2\left\{\left[\frac{\gamma^2}{\hbar^2} + \frac{(\omega-\omega_{21})^2}{4}\right]^{1/2} t\right\} \tag{5.5.21a}$$

$$|c_1(t)|^2 = 1 - |c_2(t)|^2 \tag{5.5.21b}$$

$$\omega_{21} \equiv \frac{E_2 - E_1}{\hbar} \tag{5.5.22}$$

で与えられる (分子線技術の父であるI. I. ラビの名を取り，**ラビの公式**といわれる)．この章末の問題30を解いて上式を確めよ．

ここで $|c_2|^2$ をもう少し詳しく見てみよう．エネルギー E_2 の上の状態に系を見出す確率は，角振動数

$$\Omega = \sqrt{\frac{\gamma^2}{\hbar^2} + \frac{(\omega-\omega_{21})^2}{4}} \tag{5.5.23}$$

の2倍で振動する時間依存性を示す．振動の振幅は

$$\omega \simeq \omega_{21} = \frac{E_2 - E_1}{\hbar} \tag{5.5.24}$$

のとき，非常に大きい．こうなるのはふつう外部からかける電場や磁場によるポテンシャルの角振動数が，2準位系を特徴づける角振動数とほぼ等しいときである．等式(5.5.24)はそれゆえ**共鳴条件**と呼ばれている．

(5.5.21a)と(5.5.21b)をちょうど共鳴点で少し詳しくみると，いろいろなことが分かる：

$$\omega = \omega_{21}, \quad \Omega = \frac{\gamma}{\hbar}. \tag{5.5.25}$$

$|c_1(t)|$ と $|c_2(t)|^2$ を t の関数としてプロットすることができる．図5.4を見よ．

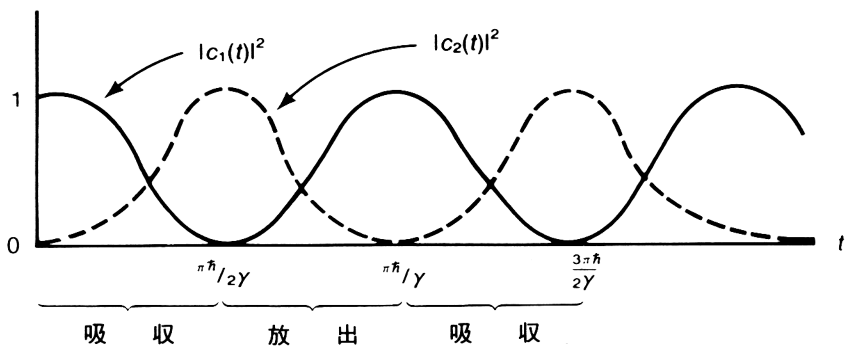


図 5.4. ちょうど共鳴していて $\omega = \omega_{21}$, $\Omega = \gamma/\hbar$ であるときの $|c_1(t)|^2$, $|c_2(t)|^2$ を時間に対して描く．このグラフは |1> と |2> の間を状態が往復する様子も表わしている．

$t=0$ から $t=\pi\hbar/2\gamma$ までは2準位系が，時間に依存するポテンシャル $V(t)$ からエネルギーを吸収する．$|c_1(t)|^2$ は1から減少し，$|c_2(t)|^2$ はそれにつれて大きくなる．$t=\pi\hbar/2\gamma$ では上の状態だけが占められる．$t=\pi\hbar/2\gamma$ から $t=\pi\hbar/\gamma$ までは，系が余分なエネルギー［（上の）励起状態からの］を $V(t)$

へ与える．$|c_2|^2$ は減少し $|c_1|^2$ は増加する．この吸収-放出サイクルは図5.4にも示されているように無限にくりかえされる．したがって $V(t)$ はエネルギーの源であり吸い込みであると見なすことができる．別のいい方をすると $V(t)$ は，$|1\rangle$ から $|2\rangle$ への遷移(吸収)ないし $|2\rangle$ から $|1\rangle$ への遷移(放出)を引き起こすことができる．この視点には放射の放出・吸収を議論するときにまた，たち戻ることにしよう．

吸収-放出サイクルは，たとえ共鳴点から離れていても起こっている．しかし $|2\rangle$ の振動振幅は減っている．$|c_2(t)|^2_{\max}$ はもはや 1 でなく，$|c_1(t)|^2$ も全行程の間ゼロにはならない．図5.5 に $|c_2(t)|^2_{\max}$ を ω の関数として描いた．この曲線は $\omega=\omega_{21}$ のまわりを中心にした共鳴のピークを持ち，半値幅の全幅は $4\gamma/\hbar$ で与えられる．時間に依存するポテンシャルが弱いほど(γ が小さいほど)，共鳴ピークは狭くなることに注意しておこう．

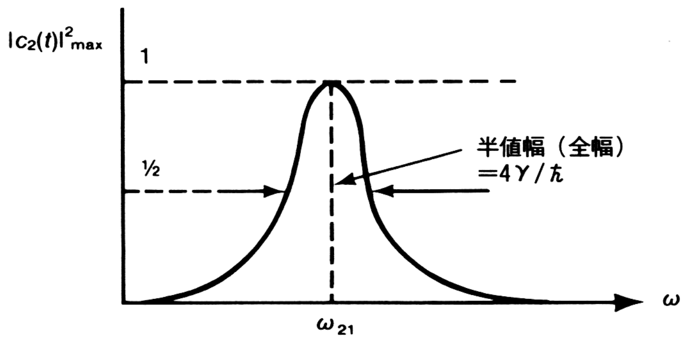


図 5.5.　$|c_2(t)|^2_{\max}$ を ω の関数として描く．$\omega=\omega_{21}$ は共鳴振動数に対応する．

スピン磁気共鳴

(5.5.18) 式で定義されている 2 準位問題には，数多くの物理的応用がある．最初の例としてスピン 1/2 の系——例えば 1 個の束縛電子——が時間によらない一様な z-方向の磁場中にあり，さらに xy-平面内を回転する時

間に依存する磁場もかけられている場合

$$\boldsymbol{B} = B_0\hat{\boldsymbol{z}} + B_1(\hat{\boldsymbol{x}}\cos\omega t + \hat{\boldsymbol{y}}\sin\omega t) \tag{5.5.26}$$

を考えよう．B_0, B_1 は定数である．t-依存性のない一様な場の効果を H_0 とし，回転場の効果を V として取扱うことができる．磁気モーメントは

$$\boldsymbol{\mu} = \frac{e}{m_e c}\boldsymbol{S} \tag{5.5.27}$$

であるから

$$H_0 = -\frac{e\hbar B_0}{2m_e c}(|+\rangle\langle+| - |-\rangle\langle-|)$$

$$V(t) = -\frac{e\hbar B_1}{2m_e c}[\cos\omega t(|+\rangle\langle-| + |-\rangle\langle+|)$$

$$+ \sin\omega t(-i|+\rangle\langle-| + i|-\rangle\langle+|)] \tag{5.5.28}$$

と表わせる．ここでケット-ブラで構成した $2S_j/\hbar$ を用いた[(3.2.1)を参照]．$e<0$ なので E_+ はE_- よりエネルギーが高く，(5.5.18)の記法と対応させると

$$\begin{aligned} |+\rangle &\to |2\rangle \quad (\text{上の準位}) \\ |-\rangle &\to |1\rangle \quad (\text{下の準位}) \end{aligned} \tag{5.5.29}$$

のように同定できる．この 2 準位系を特徴づける角振動数は

$$\omega_{21} = \frac{|e|B_0}{m_e c} \tag{5.5.30}$$

であり，これはちょうど2.1節で取扱ったことのある $B_0 \neq 0$, $B_1 = 0$とした問題のスピン歳差振動である．反時計まわり（z-軸の正方向から見て）のスピンの歳差運動によって，$\langle S_{x,y}\rangle$ の期待値は変化するが，回転場がなければ $|c_+|^2$ と $|c_-|^2$ はいつまでも変化しない．回転磁場があるとその結果，新しい特徴が加わる：$|c_+|^2$ と $|c_-|^2$ が時間の関数として変化するのである．これは，(5.5.18)の記法と対応させて

$$\frac{-e\hbar B_1}{2m_e c} \to \gamma, \quad \omega \to \omega \tag{5.5.31}$$

と置くと分かる．すると時間に依存する相互作用(5.5.28)は，正に(5.5.18)の形である．(5.5.29)のように対応させると $\omega = \omega_{21}$ に対して $|c_+(t)|^2$ と $|c_-(t)|^2$ が図5.4によって示されているように変化するが，これはスピン 1/2 の系がスピンの歳差運動に加えてスピン反転 $|+> \rightleftarrows |->$ をくり返していることを示している．半古典的には，このようなスピン反転は回転場 $\boldsymbol{B}$ によってひきおこされるトルクのためであると解釈できる．

共鳴条件は，回転磁場の振動数が，一様な磁場の強さにより決まるスピン歳差振動数と一致すれば，いつでも満足される．このときスピン反転の確率は特に大きいことが分かる．

実際に回転磁場を実験的に作るのは困難であろう．幸い水平に振動している磁場——例えば x-方向の磁場——で十分である．これを示すにはまず，このような振動磁場は反時計まわりの成分と時計まわりの成分に，次のように分解できることに注目しよう：

$$2B_1\hat{\boldsymbol{x}}\cos\omega t = B_1(\hat{\boldsymbol{x}}\cos\omega t + \hat{\boldsymbol{y}}\sin\omega t) + B_1(\hat{\boldsymbol{x}}\cos\omega t - \hat{\boldsymbol{y}}\sin\omega t). \tag{5.5.32}$$

反時計まわりの成分の効果は，ω の符号を逆にすれば得られることが分かる．共鳴条件が，反時計まわりの成分に対して満たされているとしよう．

$$\omega \simeq \omega_{21} \tag{5.5.33}$$

典形的な実験条件下では

$$B_1/B_0 \ll 1 \tag{5.5.34}$$

であり，これは(5.5.30)と(5.5.31)から

$$\frac{\gamma}{\hbar} \ll \omega_{21} \tag{5.5.35}$$

を意味している．この結果，共鳴条件が反時計まわり成分に対して満たされているときはいつも，時計まわり成分の効果は完全に無視できる．時計まわり成分に対しては $\omega\to-\omega$ であり，(5.5.21a)の振幅の大きさは小さくまた非常に速く振動している．

ここで解いた共鳴の問題は，原子分子線や核磁気共鳴の実験を解釈する際に基礎となる重要な問題である．振動磁場の振動数を変化させることにより，磁気モーメントの非常に精密な測定をすることが可能である．我々の議論は微分方程式（5.5.17）の解に基礎を置いているが，この問題はラビ，シュウィンガー，バン・ブレックの回転軸表示を導入すると，おそらくもっときれいに解くことができよう．

メーザー

時間を含む2準位系の問題のもう一つの応用として，**メーザー**を考えよう．特にアンモニア分子 NH_3 を考える．これは4.2節で述べたように，接近した二つのパリティ固有状態 $|S\rangle$ および $|A\rangle$ を持ち，$|A\rangle$ の方が少しばかりエネルギーが高い．分子の電気双極子演算子を $\boldsymbol{\mu}_{el}$ と置こう．対称性を考えて $\boldsymbol{\mu}_{el}$は N 原子の位置演算子 $\boldsymbol{x}$ に比例していると期待する．メーザーでは $\boldsymbol{E}$ をマイクロ波キャビティ内の時間に依存する電場

$$\boldsymbol{E}=|\boldsymbol{E}|_{\max}\hat{\boldsymbol{z}}\cos\omega t \tag{5.5.36}$$

として，系の相互作用を $-\boldsymbol{\mu}_{el}\cdot\boldsymbol{E}$ のように書ける．マイクロ波領域での波長は分子の大きさに較べてずっと長いので，$\boldsymbol{E}$ の空間変化は無視することが許される．振動数 ω を $|A\rangle$ と $|S\rangle$ のエネルギー差に合わせる：

$$\omega\simeq\frac{E_A-E_S}{\hbar}. \tag{5.5.37}$$

双極子演算子の対角行列要素は，パリティ対称性により消える：

$$\langle A|\boldsymbol{\mu}_{el}|A\rangle=\langle S|\boldsymbol{\mu}_{el}|S\rangle=0. \tag{5.5.38}$$

一方，非対角要素は一般に消えない：

$$<S|\boldsymbol{x}|A> = <A|\boldsymbol{x}|S> \neq 0. \tag{5.5.39}$$

すなわち $|S>$ と $|A>$ とを結ぶ時間に依存するポテンシャルが存在し，先に議論した一般の 2 準位系の問題がここで応用できる.

これよりメーザーがどのように作用するかを議論しよう．NH_3 の分子線がはじめ $|S>$ と $|A>$ を共に含んでいるとする．まずこの分子線を時間に依存しない不均一な電場領域に通し，$|S>$ 成分を消去する．このような電場が $|A>$ と $|S>$ を分離させる様子は，シュテルン・ゲルラッハの実験で不均一な磁場が $|->$ と $|+>$ を分離させるのと同様である[†]．さて一本の純粋な分子線 $|A>$ がエネルギー差 $E_A - E_S$ に調整したマイクロ波キャビティーに入る．キャビティーの寸法は分子がその中を通過する時間が，ちょうど $(\pi/2)\hbar/\gamma$ になるようにしてある．その結果，系は図 5.4 の第 1 放出期にあり，$|A>$ が入り $|S>$ が出ていく。$|A>$ が $|S>$ に変るとき，$|A>$ の余分なエネルギーは時間に依存するポテンシャルに与えられ，輻射（マイクロ波）場はエネルギーを獲得する．こうして輻射の誘導放出によるマイクロ波の増幅 (Microwave Amplification by Stimulated Emission of Radiation) すなわち MASER が得られる.

一般に時間を含む 2 準位系の問題には，他に原子時計や光学的ポンピングといった多くの応用がある．実際，物理部門のノーベル賞が 4 件も，時間を含むある種の 2 準位系を研究した人々に与えられたことは興味深い*.

---

† 訳注：弱い定常電場中では摂動により $|S>$，$|A>$ にそれぞれ $|A>$，$|S>$ が混ざり，電気双極子が誘起される．このため不均一電場を通過するとき，分子線の分離がおこる．詳細はサージェント他：「レーザー物理」（霜田他訳）丸善．p. 67参照.

* 2 準位系の共鳴を扱ってノーベル賞を受賞した人達は，分子線と核磁気共鳴に対してラビ (1944)，原子核における $\boldsymbol{B}$ 場と核磁気モーメントに対してブロッホとパーセル (1952)，メザーとレーザーおよび量子光学に対してタウンズ，バソフおよびプロチョロフ (1964)，光学的ポンピングに対してカストラー (1966) である.

5.6 時間を含む摂動論

ダイソン級数

前節で扱った時間に依存する2準位問題のような少数の問題は例外にして，$c_n(t)$ に対する微分方程式の厳密解は，ふつう求められない．我々は(5.5.17)の近似解として，摂動展開で得られるもの

$$c_n(t) = c_n^{(0)} + c_n^{(1)} + c_n^{(2)} + \cdots\cdots \tag{5.6.1}$$

で満足しなければならない．ここで $c_n^{(1)}$, $c_n^{(2)}$, ……は，時間に依存するポテンシャルの大きさのパラメータに関して，1次，2次……の振幅を表わす．この問題を解くために用いられる逐似近似法は，時間を含まない摂動論で用いた方法と似ている．もし始めに状態 i のみが占められているとすると，微分方程式(5.5.17)の右辺にある c_n を $c_n^{(0)} = \delta_{ni}$(t を含まない)で近似し，$c_n^{(1)}$ の時間微分と関係づける。この微分方程式を積分し $c_n^{(1)}$ を求め，(5.5.17)の右辺に $c_n^{(1)}$ を代入して今度は $c_n^{(2)}$ に対する微分方程式を得る，といった具合である．これが1927年，ディラックが発展させた，時間を含む摂動論である．

$c_n(t)$ を問題にする代りに相互作用表示で時間的発展の演算子 $U_I(t, t_0)$ を調べて見よう．$U_I(t. t_0)$ の定義はすぐ後で与える．$U_I(t, t_0)$ に対する摂動展開をまず求め，一番最後に U_I の行列要素を $c_n(t)$ と関係づける．我々の興味が非相対論的量子力学の簡単な問題を解くことだけにあるのなら，こうしたことは余計なことに思えるかも知れない．しかしこれから展開する演算子の理論は大変強力なもので，相対論的量子場の理論や多体問題の理論のようなもっと高度な問題に，ただちに応用できる．

相互作用表示での時間発展の演算子は

$$|\alpha,\ t_0\,;\,t\rangle_I = U_I(t,\,t_0)|\alpha,\ t_0\,;\,t_0\rangle_I \tag{5.6.2}$$

により定義される．相互作用表示での状態ケットに対する微分方程式(5.5.11)は

$$i\hbar\frac{d}{dt}U_I(t,\ t_0)=V_I(t)U_I(t,\ t_0) \tag{5.6.3}$$

と同値である．この演算子に対する微分方程式を，初期条件

$$U_I(t,\ t_0)|_{t=t_0}=1 \tag{5.6.4}$$

で解かなければならない．まず，初期条件をつけたこの微分方程式が，次の積分方程式

$$U_I(t,\ t_0)=1-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t}V_I(t')U_I(t',\ t_0)dt' \tag{5.6.5}$$

と同値であることに注目しよう．この方程式の近似解は，逐次近似により得られる：

$$\begin{aligned}U_I(t,\ t_0)&=1-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t}V_I(t')\left[1-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t'}V_I(t'')U_I(t'',\ t_0)dt''\right]dt'\\&=1-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t}dt'\,V_I(t')+\left(\frac{-i}{\hbar}\right)^2\int_{t_0}^{t}dt'\int_{t_0}^{t'}dt''\,V_I(t')V_I(t'')\\&\quad+\cdots\cdots+\left(\frac{-i}{\hbar}\right)^n\int_{t_0}^{t}dt'\int_{t_0}^{t'}dt''\cdots\int_{t_0}^{t^{(n-1)}}dt^{(n)}\,V_I(t')V_I(t'')\cdots V_I(t^{(n)})\\&\quad+\cdots\cdots.\end{aligned} \tag{5.6.6}$$

この級数はこの方法を共変的量子電気力学(QED)に応用したフリーマン・J・ダイソンの名にちなみ，**ダイソン級数**と呼ばれている*．収束性のむずかしい問題はさておき，$U_I(t,\ t_0)$を摂動論の任意な有限次数まで，計算することができる．

---

* QEDでは時間の順序をつけた積（$t'>t''>\cdots$）を導入することにより，この摂動級数を指数関数の形にたし合わせている．指数関数の形は直ちに，$U(t,\ t_0)=U(t,\ t_1)U(t_1,\ t_0)$を与える．（Bjorken and Drell 1965, pp. 175-78）

遷移確率

ひとたび $U_I(t, t_0)$ が与えられると，任意の状態ケットの時間発展が予言できる．例えば $t=0$ での始状態が H_0 の一つのエネルギー固有状態であったとすると，時間がたったときのこの状態を得るのに必要なことは単に $U_I(t, 0)$ をかけることである：

$$|i,\ t_0=0\,;\,t\rangle_I = U_I(t, 0)|i\rangle$$
$$= \sum_n |n\rangle\langle n|U_I(t, 0)|i\rangle. \tag{5.6.7}$$

事実 $\langle n|U_I(t, 0)|i\rangle$ は，以前 $c_n(t)$ と呼んだもの［(5.5.13)を見よ］に他ならない．このことに関してはすぐ後に詳しく述べる．

以前に時間的発展の演算子 $U(t, t_0)$ をシュレーディンガー表示で導入した［2.2節を見よ］.† ここで $U(t, t_0)$ と $U_I(t, t_0)$ の関連を調べよう．(2.2.13)と(5.5.5)から

$$|\alpha,\ t_0\,;\,t\rangle_I = e^{iH_0t/\hbar}|\alpha,\ t_0\,;\,t\rangle_S$$
$$= e^{iH_0t/\hbar}U(t, t_0)|\alpha,\ t_0\,;\,t_0\rangle_S$$
$$= e^{iH_0t/\hbar}U(t, t_0)e^{-iH_0t_0/\hbar}|\alpha,\ t_0\,;\,t_0\rangle_I \tag{5.6.8}$$

となることに着目しよう．したがって

$$U_I(t, t_0) = e^{iH_0t/\hbar}\,U(t, t_0)e^{-iH_0t_0/\hbar} \tag{5.6.9}$$

が成り立つ．次に $U_I(t, t_0)$ の行列要素を，H_0 のエネルギー固有状態の間で取ってみよう：

$$\langle n|U_I(t, t_0)|i\rangle = e^{i(E_nt-E_it_0)/\hbar}\langle n|U(t, t_0)|i\rangle. \tag{5.6.10}$$

---

† 訳注：第２章では $\mathcal{U}(t, t_0)$ の記号で表わした．

2.2節で $\langle n|U(t, t_0)|i\rangle$ を遷移振幅として定義したことを思い出そう．したがってこの $\langle n|U_I(t, t_0)|i\rangle$ は，以前に定義した遷移振幅と全く同じではない．しかし $\langle n|U(t, t_0)|i\rangle$ の絶対値の2乗として定義される遷移確率は，相互作用表示における類似の量と同じである：

$$|\langle n|U_I(t, t_0)|i\rangle|^2 = |\langle n|U(t, t_0)|i\rangle|^2. \tag{5.6.11}$$

補足的な注意として，U_I の行列要素をエネルギー固有状態ではない始状態，終状態間で取った場合を考えよう．例えば $[H_0, A]\neq 0$ および／あるいは $[H_0, B]\neq 0$ である A, B の固有ケット $|a'\rangle$，$|b'\rangle$ の間で取ったとする．このときは一般に

$$|\langle b'|U_I(t, t_0)|a'\rangle| \neq |\langle b'|U(t, t_0)|a'\rangle|$$

であることが容易に確かめられるであろう．さいわい相互作用表示が有用であるような問題では，ふつう始状態と終状態を H_0 の固有状態にとれる．そうでないときは，$|a'\rangle$ や $|b'\rangle$ などを H_0 のエネルギー固有ケットで展開してやればよい．

ふたたび $\langle n|U_I(t, t_0)|i\rangle$ に戻り，$t = t_0$ で系が H_0 の固有状態 $|i\rangle$ にあったことが分っているときの物理的状況を考えながら説明しよう．このときシュレーディンガー表示の状態ケット $|i, t_0; t_0\rangle_S$ は，位相因子を別にして $|i\rangle$ である．相互作用表示を適用する際には，$t = t_0$ での位相因子を

$$|i, t_0; t_0\rangle_S = e^{-iE_i t_0/\hbar}|i\rangle \tag{5.6.12}$$

のように選ぶと便利である．こうすると相互作用表示で簡単な等式

$$|i, t_0; t_0\rangle_I = |i\rangle \tag{5.6.13}$$

が得られる．時間がたつと

$$|i, t_0; t\rangle_I = U_I(t, t_0)|i\rangle \tag{5.6.14}$$

となるが，これを

$$|i,\ t_0\ ;\ t>_I = \sum_n c_n(t)|n> \tag{5.6.15}$$

と比較すると

$$c_n(t) = <n|\,U_I(t,\ t_0)|\,i> \tag{5.6.16}$$

であることが分かる．

ここで $U_I(t,\ t_0)$ の摂動展開［(5.6.6)を見よ］に戻る．(5.6.1)にあるように $c_n(t)$ を展開することもできる．ここで $c_n^{(1)}$ は $V_I(t)$ の1次，$c_n^{(2)}$ は $V_I(t)$ の2次，といった具合である．(5.6.16)の両辺の展開式を比較して(5.5.7)を用いると

$$\begin{aligned}
c_n^{(0)}(t) &= \delta_{ni} \quad (t\text{ に依らない}) \\
c_n^{(1)}(t) &= \frac{-i}{\hbar}\int_{t_0}^{t}<n|\,V_I(t')|\,i>dt' \\
&= \frac{-i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} e^{i\omega_{ni}t'}V_{ni}(t')dt' \\
c_n^{(2)}(t) &= \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^2\sum_m\int_{t_0}^{t}dt'\int_{t_0}^{t'}dt''\,e^{i\omega_{nm}t'}V_{nm}(t')e^{i\omega_{mi}t''}V_{mi}(t'')
\end{aligned} \tag{5.6.17}$$

などが得られる．ここで

$$e^{i(E_n-E_i)t/\hbar} = e^{i\omega_{ni}t} \tag{5.6.18}$$

を用いた．$|i>$ から $|n>$ へ移る遷移確率は，$n \neq i$ として

$$P(i\rightarrow n) = |\,c_n^{(1)}(t) + c_n^{(2)}(t) + \cdots\cdots|^2 \tag{5.6.19}$$

によって得られる．

一定値をとる摂動

(5.6.7)の応用として，$t=0$で摂動がかけられそれが一定値を保つ場合を考えよう：

$$V(t)=\begin{cases}0, & t<0\\ V\ (\text{時間に依らない}) & t>0\end{cases} \tag{5.6.20}$$

演算子 V はあからさまに時間に依っていないが，一般に $\boldsymbol{x}$，$\boldsymbol{p}$，$\boldsymbol{s}$ といった演算子から構成されている．時刻 $t=0$ で $|i\rangle$ だけであったとしよう．t_0 をゼロに取ると

$$\begin{aligned}c_n^{(0)}&=c_n^{(0)}(0)=\delta_{in}\,,\\ c_n^{(1)}&=\frac{-i}{\hbar}V_{ni}\int_0^t e^{i\omega_{ni}t'}dt'\\ &=\frac{V_{ni}}{E_n-E_i}(1-e^{i\omega_{ni}t})\end{aligned} \tag{5.6.21}$$

すなわち

$$\begin{aligned}|c_n^{(1)}|^2&=\frac{|V_{ni}|^2}{|E_n-E_i|^2}(2-2\cos\omega_{ni}t)\\ &=\frac{4|V_{ni}|^2}{|E_n-E_i|^2}\sin^2\left[\frac{(E_n-E_i)t}{2\hbar}\right]\end{aligned} \tag{5.6.22}$$

が得られる．

状態 $|n\rangle$ を見い出す確率は $|V_{ni}|^2$ に依存するだけでなく，エネルギー差 E_n-E_i にも依る．そこで (5.6.22) が E_n の関数としてどのように見えるか調べてみよう．実際 (5.6.22) を調べるのに $E\sim E_n$ の多くの状態があり，ほとんど同じエネルギーの連続的な終状態が扱える場合を考えることにする．このために

$$\omega\equiv\frac{E_n-E_i}{\hbar} \tag{5.6.23}$$

を定義し，摂動がかけられている時間間隔 t を固定して $4\sin^2(\omega t/2)/\omega^2$ を ω の関数として図に描く．図5.6を見よ．$\omega=0$のまわりの中央のピークは高さが t^2，幅が $1/t$ に比例している．t が長くなるにつれ，$|c_n^{(1)}(t)|^2$ が比較的大きな値を持つのは終状態のエネルギーが

$$t\sim\frac{2\pi}{\omega}=\frac{2\pi\hbar}{|E_n-E_i|} \tag{5.6.24}$$

を満たす場合に限られる．摂動が加えられてからの時間間隔を Δt で表わすことにすると，比較的大きな確率を持つ遷移が可能なのは

$$\Delta t\,\Delta E\sim\hbar \tag{5.6.25}$$

のときのみである．ここで ΔE は比較的大きな確率の遷移に伴うエネルギー変化を意味する．もし Δt が小さいと図5.6のピークは幅広くなり，その結果

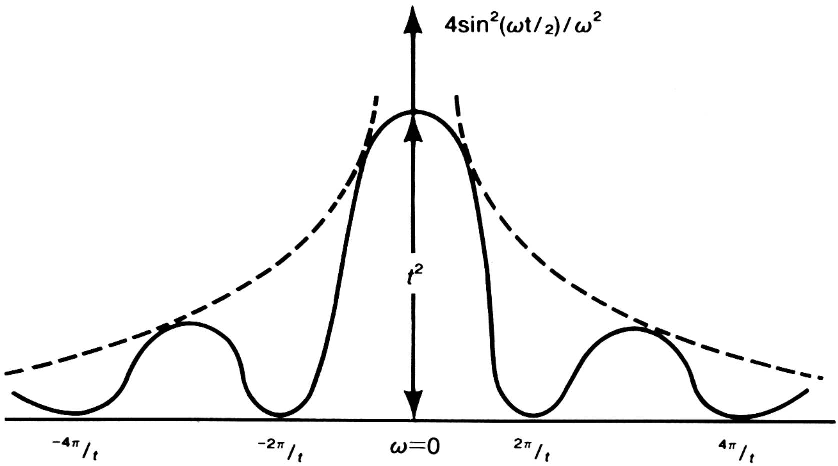


図 5.6. t を固定し ω の関数として描いた $4\sin^2(\omega t/2)/\omega^2$．$\omega=(E_n-E_i)/\hbar$ の中の E_n は連続変数と見なした．

かなりの量のエネルギー非保存を黙認することができる．一方，摂動が長い間かかっているときはピークの幅は狭くなり，比較的大きな確率の遷移に対して

は近似的なエネルギー保存則が要求される．この“不確定関係”は1.6節の x - p の不確定関係と根本的に違うことを注意しよう．そこでは x も p も観測量であった．それに対し非相対論的量子力学における時間は，観測量でなくパラメータである．

厳密にエネルギーが保存し $E_n = E_i$ である遷移に対しては

$$|c_n^{(1)}(t)|^2 = \frac{1}{\hbar^2}|V_{ni}|^2 t^2 \tag{5.6.26}$$

である．時間間隔 t の後に $|n\rangle$ を見出す確率は，V がかけられている時間間隔に関して2次であり1次でない．これは直観的に不合理に見える．しかし心配するほどの理由はない．我々の理論が適用される現実の場面では，始状態 $|i\rangle$ とほぼ同じエネルギーを持つ一群の終状態がふつう存在する．いい換えれば終状態は E_i の近傍で連続的なエネルギースペクトルを作っている．このような例を二つあげよう．例えば，力のおよぶ範囲が有限なポテンシャルによる弾性散乱を考える（図5.7を見よ）．詳しくは第7章で考察する．始状態としてとるのは，z-軸の正方向に進む平面波の状態である．終状態もやはり同じエネルギーの平面波状態であろうが，進行方向は一般に z-軸の正方向とは異なる方向にある．興味あるもう一つの例は，励起状態の原子がオージェ電子を放出してエネルギーの低い状態に移る遷移である．最も単純な例はヘリウム原子である．始状態は，電子が二つとも励起した$(2s)^2$としよう。終状態は，He^+ イオンの(1s)で（すなわち一つの電子は依然として束縛されていて），2番目の電子は正のエネルギー E を持ち離脱する．図5.8を見よ．このような場合，我々に興味あるのは全確率——すなわち $E_n \sim E_i$ の終状態に関して和をとった遷移確率である：

$$\sum_{n,\ E_n \doteqdot E_i} |c_n^{(1)}|^2. \tag{5.6.27}$$

慣習に従い終状態の密度を，$(E,\ E+dE)$ のエネルギー間隔にある状態数が

$$\rho(E)dE \tag{5.6.28}$$

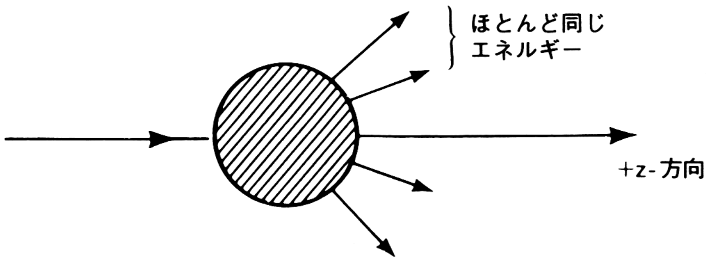


図 5.7. 到達範囲が有限なポテンシャルによる平面波の弾性散乱.

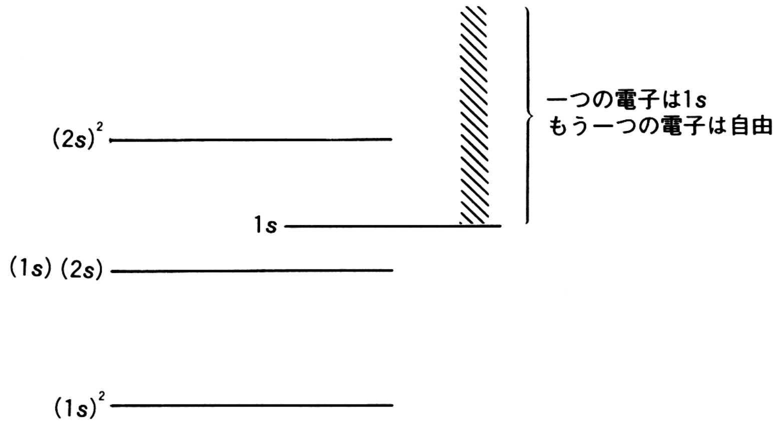


図 5.8. ヘリウム原子の2電子エネルギー準位の略図. [訳注：原図を変更した]

になるように定義する. すると(5.6.27)を

$$\sum_{n,\ E_n=E_i} |c_n^{(1)}|^2 \Rightarrow \int dE_n\, \rho(E_n) |c_n^{(1)}|^2$$

$$= 4\int \sin^2\left[\frac{(E_n-E_i)t}{2\hbar}\right] \frac{|V_{ni}|^2}{|E_n-E_i|^2}\rho(E_n) dE_n \qquad (5.6.29)$$

のように書くことができる. $t\to\infty$ のときは

$$\lim_{t\to\infty}\frac{1}{|E_n-E_i|^2}\sin^2\left[\frac{(E_n-E_i)t}{2\hbar}\right] = \frac{\pi t}{2\hbar}\delta(E_n-E_i) \qquad (5.6.30)$$

を利用する. この式は

$$\lim_{\alpha\to\infty}\frac{1}{\pi}\frac{\sin^2\alpha x}{\alpha x^2}=\delta(x) \tag{5.6.31}$$

から導ける．すると $|V_{ni}|^2$ の平均を積分記号の外へ取り出し，δ-関数を含む積分を実行することができる：

$$\lim_{t\to\infty}\int dE_n\,\rho(E_n)|c_n^{(1)}(t)|^2=\frac{2\pi}{\hbar}\overline{|V_{ni}|^2}\,\rho(E_n)\,t\,\Big|_{E_n=E_i} \tag{5.6.32}$$

このように t の大きな値に対して全遷移確率は t に比例する．これはまことにもっともである．t に関する線形性は全遷移確率が図5.6のピークの下の面積に比例することの結果であることに注意しよう．このピークの高さは t^2 の変化をし，幅は $1/t$ の変化をする．

ふつう**遷移率**（transition rate）——すなわち単位時間あたりの遷移確率を考える．表式(5.6.32)は

$$\frac{d}{dt}\left(\sum_n|c_n^{(1)}|^2\right) \tag{5.6.33}$$

で定義される全遷移率が，大きな t に対しては t に関して一定であることを示している．$[n]$ を i とエネルギーが近い一群の終状態を表わすことにすると，(5.6.33)を $w_{i\to[n]}$ と置き

$$w_{i\to[n]}=\frac{2\pi}{\hbar}\overline{|V_{ni}|^2}\,\rho(E_n)_{E_n\simeq E_i} \tag{5.6.34}$$

が得られる．これは時間に依らず，時間を含む1次の摂動論が有効なとき成り立つ．この式は実際上非常に重要である．時間を含む摂動論の基礎的な定式化を行なったのは，ディラックであるがこの式は**フェルミの黄金則**と呼ばれる*.

* 編者註：エドワード・テラー博士が1955年にバークレーで量子力学のクラスを教えていたとき（編者も出席していたが），この表式は実はフェルミの第2黄金則であると述べた．テラーは第1の黄金則については述べなかったので，クラスの者は何が第1則だか分からなかった．第1の黄金則とは E. Fremi 1950, p. 136と p. 148に与えられているものである．

ときどき(5.6.34)は

$$w_{i\to n}=\frac{2\pi}{\hbar}|V_{ni}|^2\delta(E_n-E_i) \tag{5.6.35}$$

と書かれるが，そのときはこの表式が$\int dE_n\,\rho(E_n)$で積分されるものと理解しなければならない．

また$\overline{|V_{ni}|^2}$の意味することも正しく理解しなければならない．終状態$|n>$が準連続体であるならば，$|n>$が同様なら行列要素V_{ni}もたいてい同様である．しかし同じE_nを持つエネルギー固有状態のすべてが，必ずしも同様な行列要素を持たないこともある．例えば弾性散乱を考えてみよう．散乱断面積を決める$|V_{ni}|^2$は，終状態の運動量方向に依存している場合もあろう．そのような場合に考えるべき終状態のグループは，近似的に同じエネルギーを持たなければならないばかりではなく，近似的に同じ運動量方向をも持たなければならない．この点はのちに光電子効果を議論するとき，さらに明確になるであろう．

次にやはり一定値をとる摂動(5.6.20)で，2次の項を調べよう．(5.6.17)から

$$\begin{aligned}c_n^{(2)}&=\left(\frac{-i}{\hbar}\right)^2\sum_m V_{nm}V_{mi}\int_0^t dt'\,e^{i\omega_{nm}t'}\int_0^{t'}dt''\,e^{i\omega_{mi}t''}\\&=\frac{i}{\hbar}\sum_m\frac{V_{nm}V_{mi}}{E_m-E_i}\int_0^t\left(e^{i\omega_{ni}t'}-e^{i\omega_{nm}t'}\right)dt'\end{aligned} \tag{5.6.36}$$

が得られる．右辺第1項は$c_n^{(1)}$と同じt-依存性を持つ[(5.6.21)を見よ]．これが唯一の項であったなら以前と同じ議論を繰返し，$t\to\infty$で重要な寄与は$E_n\simeq E_i$からくると結論できる．実際E_mがE_nともE_iとも異なるとき，第2の項は速く振動し，tと共に増大する遷移確率へ寄与しない．

$c^{(1)}$と$c^{(2)}$を一緒にすると

$$w_{i\to[n]}=\frac{2\pi}{\hbar}\overline{\left|V_{ni}+\sum\frac{V_{nm}V_{mi}}{E_m-E_i}\right|^2\rho(E_n)}\Bigg| \tag{5.6.37}$$

となる．この式は次のように物理的に解釈できる．2次の項による遷移は2段階で起こると見なそう．第1に $|i\rangle$ が $|m\rangle$ へエネルギー非保存の遷移をする．続いて $|m\rangle$ が $|n\rangle$ へエネルギーの非保存の遷移をする．ここで $|n\rangle$ と $|i\rangle$ の間には全体としてのエネルギー保存が成立する．このようなエネルギー非保存の遷移は，しばしば仮の遷移（仮想遷移）と呼ばれる．仮の中間状態への（もしくは，状態からの）仮の遷移に対して，エネルギーは必ずしも保存していない．これと対照的に，1次の項 V_{ni} はよくいわれるようにエネルギーを保存する直接的な“実の”遷移をあらわしている．$E_m \simeq E_i$ で $V_{nm}V_{mi} \neq 0$ の時は，特別な取扱いが必要である．これを扱う一番よい方法は，V をゆっくりかける方法 $V \to e^{\eta t}V$ を用いることであるが，これについては5.8節およびこの章末の問題31で論じよう．正味の結果は，(5.6.37)のエネルギー分母を次のように変化させることになる：

$$E_i - E_m \to E_i - E_m + i\varepsilon. \qquad (5.6.38)$$

調和摂動

次に普通，**調和摂動**（harmonic perturbation）といわれる正弦的時間変化をするポテンシャル

$$V(t) = \mathcal{V} e^{i\omega t} + \mathcal{V}^{\dagger} e^{-i\omega t} \qquad (5.6.39)$$

を考察しよう．ここで $\mathcal{V}$ は $\boldsymbol{x}$，$\boldsymbol{p}$，$\boldsymbol{s}$ などに依存していてもよい．実際時間に依存するこの種のポテンシャルには，5.5節で時間に依存する2準位系を議論したとき出会っている．

ここでもまた，初めに占められていたのは H_0 の一つの固有状態だけであると仮定しよう．摂動(5.6.39)が $t=0$ で入れられたとすると

$$c_n^{(1)} = \frac{-i}{\hbar}\int_0^t (\mathcal{V}_{ni} e^{i\omega t'} + \mathcal{V}^{\dagger}_{ni} e^{-i\omega t'})\, e^{i\omega_{ni} t'} dt'$$

$$= \frac{1}{\ }\left[\frac{1-e^{i(\omega+\omega_{ni})t}}{\ }\mathcal{V}^{+}_{ni} + \frac{1-e^{i(\omega_{ni}-\omega)t}}{\ }\mathcal{V}^{+}_{ni}\right] \qquad (5.6.40)$$

である．上式で $\mathcal{V}^{\dagger}_{ni}$ とは実は $(\mathcal{V}^{\dagger})_{ni}$ のことである．この式は一定値をとる摂動の場合の式（5.6.21）に似ている．必要な変更は

$$\omega_{ni}=\frac{E_n-E_i}{\hbar}\rightarrow\omega_{ni}\pm\omega \tag{5.6.41}$$

とすることだけである．そこで $t\rightarrow\infty$ のとき，$|c_n^{(1)}|^2$がかなり大きな値を持つのは

$$\omega_{ni}+\omega\simeq0 \quad すなわち \quad E_n\simeq E_i-\hbar\omega \tag{5.6.42a}$$

$$\omega_{ni}-\omega\simeq0 \quad すなわち \quad E_n\simeq E_i+\hbar\omega \tag{5.6.42b}$$

のときのみである．(5.6.42a) が満足され (5.6.40) の第1項が重要なときはいつも，第2項は明らかに重要でなくその逆も成り立つ．エネルギー保存の条件は，量子力学系だけで満たされているのではなく，外見上欠けているエネルギーの保存は，"外部" ポテンシャル $V(t)$ へ与えるエネルギー——または $V(t)$から取り入れるエネルギー——によって償われている．これを図で表わすと図5.9のようである．第1の場合（誘導放出）では，量子力学系がエネルギー $\hbar\omega$ を V に与える．これが可能なのは明らかに始状態が励起していると

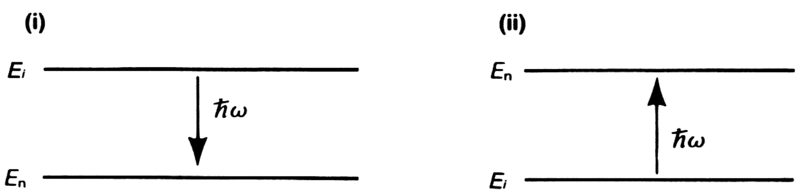


図 5.9. (i) 誘導放出：量子力学系が V に $\hbar\omega$ を与える．（初期状態が励起状態であるときのみ可能．）
(ii) 吸収：量子力学系が V から $\hbar\omega$ を受け取り励起状態になる．

きのみである．第2の場合（吸収）では，量子力学系が V からエネルギー $\hbar\omega$ を受け取り，励起状態になる．このように時間に依存する摂動は，エネルギーをいくらでもやりとりする湧き出しないし吸い込みと見なすことができる．

遷移率に関しては (5.6.34) と全くよく似た形で

$$
\begin{aligned}
w_{i\to[n]} &= \frac{2\pi}{\hbar}\overline{|\mathcal{V}_{ni}|^2}\,\rho(E_n)\Big|_{E_n\simeq E_i-\hbar\omega} \\
w_{i\to[n]} &= \frac{2\pi}{\hbar}\overline{|\mathcal{V}_{ni}{}^{\dagger}|^2}\rho(E_n)\Big|_{E_n\simeq E_i+\hbar\omega}
\end{aligned}
\tag{5.6.43}
$$

が成り立つ．あるいはもっと共通な形で

$$
w_{i\to n} = \frac{2\pi}{\hbar}\left\{\begin{matrix}|\mathcal{V}_{ni}|^2 \\ |\mathcal{V}_{ni}{}^{\dagger}|^2\end{matrix}\right\}\delta(E_n - E_i \pm \hbar\omega) \tag{5.6.44}
$$

と表わせる．また

$$
|\mathcal{V}_{ni}|^2 = |\mathcal{V}_{in}{}^{\dagger}|^2 \tag{5.6.45}
$$

にも注意しよう．これは

$$
\langle i|\mathcal{V}^{\dagger}|n\rangle = \langle n|\mathcal{V}|i\rangle^* \tag{5.6.46}
$$

の帰結である ($\mathcal{V}^{\dagger}|n\rangle \overset{\text{DC}}{\longleftrightarrow} \langle n|\mathcal{V}$ を思い出せ)．(5.6.43)と(5.6.45)とを一つにすると

$$
\frac{i\to[n]\text{の放出率}}{[n]\text{の終状態密度}} = \frac{n\to[i]\text{の吸収率}}{[i]\text{の終状態密度}} \tag{5.6.47}
$$

となる．この式では吸収の場合に i が終状態を表わすようにしている．放出と吸収との間の対称性を表わしている等式 (5.6.47) は，**詳細つりあい**の式と呼ばれている．

要約すると，一定値をとる摂動の場合，遷移確率がかなり大きな値をとるのは $E_n\simeq E_i$ のときのみである．これに対し調和摂動の場合，遷移確率がかなり大きな値をとるのは $E_n\simeq E_i-\hbar\omega$（誘導放出）あるいは $E_n\simeq E_i+$

$\hbar\omega$（吸収）のときのみである．

5.7　古典的輻射場との相互作用への応用

吸収と誘導放出

時間を含む摂動論の式を，原子内電子と古典的輻射場との相互作用に応用しよう．**古典的輻射場**とは，（量子化されていない）古典的な輻射場から導かれる電場ないし磁場を意味する．

この問題のハミルトニアンは，$|\boldsymbol{A}|^2$の項を除くと

$$H = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m_e} + e\phi(\boldsymbol{x}) - \frac{e}{m_e c}\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{p} \tag{5.7.1}$$

である．これは

$$\nabla\cdot\boldsymbol{A} = 0 \tag{5.7.2}$$

である限り正しい［(5.3.20) 参照］．とくに単色平面波の場を扱うことにし

$$\boldsymbol{A} = 2A_0\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}\cos\left(\frac{\omega}{c}\hat{\boldsymbol{n}}\cdot\boldsymbol{x} - \omega t\right) \tag{5.7.3}$$

と置く．ここで $\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}$ と $\hat{\boldsymbol{n}}$ は（直線）偏光方向と伝播方向を示す．$\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}$ が伝播方向 $\hat{\boldsymbol{n}}$ と垂直なので，等式(5.7.3)は明らかに(5.7.2)を満足する．また

$$\cos\left(\frac{\omega}{c}\hat{\boldsymbol{n}}\cdot\boldsymbol{x} - \omega t\right) = \frac{1}{2}\left[e^{i(\omega/c)\hat{\boldsymbol{n}}\cdot\boldsymbol{x} - i\omega t} + e^{-i(\omega/c)\hat{\boldsymbol{n}}\cdot\boldsymbol{x} + i\omega t}\right] \tag{5.7.4}$$

と書き，(5.7.3)の $\boldsymbol{A}$ を

$$\boldsymbol{A} = A_0\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}\left[e^{i(\omega/c)\hat{\boldsymbol{n}}\cdot\boldsymbol{x} - i\omega t} + e^{-i(\omega/c)\hat{\boldsymbol{n}}\cdot\boldsymbol{x} + i\omega t}\right] \tag{5.7.5}$$

のように表わし，$-(e/m_e c)\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{p}$ を時間に依存するポテンシャルとして扱う．

この結果を(5.6.39)と比較すると

$$-\left(\frac{e}{m_e c}\right)\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{p} = -\left(\frac{e}{m_e c}\right)A_0\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}\cdot\boldsymbol{p}\left[e^{i(\omega/c)\hat{\boldsymbol{n}}\cdot\boldsymbol{x}-i\omega t} + e^{-i(\omega/c)\hat{\boldsymbol{n}}\cdot\boldsymbol{x}+i\omega t}\right] \tag{5.7.6}$$

の中の $e^{-i\omega t}$ の項は吸収に関係し，$e^{+i\omega t}$ の項は誘導放出に関係していることが分かる．

ここでは吸収の場合を詳しく取扱おう．行列要素は

$$\mathcal{V}_{ni}{}^{\dagger} = -\frac{eA_0}{m_e c}\left(e^{i(\omega/c)(\hat{\boldsymbol{n}}\cdot\boldsymbol{x})}\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}\cdot\boldsymbol{p}\right)_{ni} \tag{5.7.7}$$

であるから

$$\begin{aligned} w_{i\to n} &= \frac{2\pi}{\hbar}\frac{e^2}{m_e^2c^2}\,|A_0|^2\left|\langle n|e^{i(\omega/c)(\hat{\boldsymbol{n}}\cdot\boldsymbol{x})}\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}\cdot\boldsymbol{p}|i\rangle\right|^2 \\ &\quad\times\delta(E_n - E_i - \hbar\omega) \end{aligned} \tag{5.7.8}$$

が成り立つ．この δ-関数の意味は明らかである．$|n\rangle$ が連続的ならば，単に $\rho(E_n)$ をかけて積分する．だが $|n\rangle$ が不連続のときでも，$|n\rangle$ は（束縛状態のエネルギー準位であっても）基底状態であり得ないからエネルギー準位は無限に鋭くはない．† 有限の寿命のため生じる自然幅があるであろう（5.8節参照）．また衝突により幅ができる機構もありうる．そのような場合には $\delta(\omega - \omega_{ni})$ を

$$\delta(\omega - \omega_{ni}) = \lim_{\gamma\to 0}\left(\frac{\gamma}{2\pi}\right)\frac{1}{(\omega-\omega_{ni})^2+\gamma^2/4} \tag{5.7.9}$$

と見なす．また入射電磁波そのものも完全に単色ではない．現実には常に有限の振動数幅が存在する．

---

† 訳注：ハイトラー：「輻射の量子論」沢田克郎訳，吉岡書店　参照．

吸収断面積 σ_{abs} を

$$\frac{(i\rightarrow n)\text{の遷移で原子に吸収されるエネルギー/単位時間}}{\text{輻射場のエネルギー流束}} \tag{5.7.10}$$

として導出しよう．エネルギー流束（単位面積を通る単位時間あたりのエネルギー）に対して，古典電磁気学は

$$c\,\mathcal{U} = \frac{1}{2\pi}\frac{\omega^2}{c}\,|A_0|^2 \tag{5.7.11}$$

を与える．ここで用いたのはエネルギー密度（単位体積あたりのエネルギー）として

$$\mathcal{U} = \frac{1}{2}\left(\frac{E^2{}_{\max}}{8\pi} + \frac{B^2{}_{\max}}{8\pi}\right) \tag{5.7.12}$$

の表式と

$$\boldsymbol{E} = -\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}\boldsymbol{A},\quad \boldsymbol{B} = \boldsymbol{\nabla}\times\boldsymbol{A} \tag{5.7.13}$$

である．以上を総合して（また $\hbar\omega$ が個々の吸収過程で原子により吸収されるエネルギーであることを思い出して）

$$\begin{aligned}\sigma_{\mathrm{abs}} &= \frac{\hbar\,\omega\,(2\pi/\hbar)(e^2/m^2{}_e c^2)|A_0|^2|\langle n|e^{i(\omega/c)\hat{\boldsymbol{n}}\cdot\boldsymbol{x}}\,\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}\cdot\boldsymbol{p}|i\rangle|^2\delta(E_n - E_i - \hbar\,\omega)}{(1/2\pi)(\omega^2/c)|A_0|^2} \\ &= \frac{4\pi^2\hbar}{m_e^2\omega}\left(\frac{e^2}{\hbar\,c}\right)|\langle n|e^{i(\omega/c)\hat{\boldsymbol{n}}\cdot\boldsymbol{x}}\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}\cdot\boldsymbol{p}|i\rangle|^2\delta(E_n - E_i - \hbar\,\omega)\end{aligned} \tag{5.7.14}$$

が得られる．等式(5.7.14)は，$\alpha = e^2/\hbar\,c \simeq 1/137$（無次元）であること，および $\delta(E_n - E_i - \hbar\,\omega) = (1/\hbar)\delta(\omega_{ni} - \omega)$ で $\delta(\omega_{ni} - \omega)$ は時間の次元 T を持つことを認めると，断面積として正しい次元 $[1/(M^2/T)](M^2L^2/T^2)T = L^2$ を持っていることが分かる．

電気双極子近似

電気双極子近似（$E1$ 近似）は，輻射場の波長が原子の寸法よりはるかに長く（$\omega/c = 1/\lambda\!\!\!^-$ を思い出すと）級数

$$e^{i(\omega/c)\hat{\boldsymbol{n}}\cdot\boldsymbol{x}} = 1 + i\frac{\omega}{c}\hat{\boldsymbol{n}}\cdot\boldsymbol{x} + \cdots\cdots \tag{5.7.15}$$

が展開の初項 1 で近似できる事実に基づく．この正当性は軽い原子に対して次のように示せる：第 1 に輻射場の $\hbar\omega$ は原子の準位間隔のオーダーに違いないから

$$\hbar\omega \sim \frac{Ze^2}{(a_0/Z)} \simeq \frac{Ze^2}{R_{原子}} \tag{5.7.16}$$

である．このことから

$$\frac{c}{\omega} = \lambda\!\!\!^- = \frac{c\hbar R_{原子}}{Ze^2} \simeq \frac{137R_{原子}}{Z} \tag{5.7.17}$$

が導かれる．いいかえれば軽い原子（小さなZ）に対して

$$\frac{R_{原子}}{\lambda\!\!\!^-} \sim \frac{Z}{137} \ll 1 \tag{5.7.18}$$

となる．$\boldsymbol{x}$ の行列要素の大きさは $R_{原子}$ の程度であり，$\boldsymbol{x}^2$ のそれは $R^2_{原子}$ の程度であるといった具合なので，(5.7.15)を初項で置きかえる近似は極めてよいことが分かる．

すると

$$\langle n|e^{i(\omega/c)\hat{\boldsymbol{n}}\cdot\boldsymbol{x}}\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}\cdot\boldsymbol{p}|i\rangle \to \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}\cdot\langle n|\boldsymbol{p}|i\rangle \tag{5.7.19}$$

とできる．特に $\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}$ を x-軸の向きに（また $\hat{\boldsymbol{n}}$ を z-軸の向きに）取ろう．計算しなければならないのは $\langle n|p_x|i\rangle$ であるが

を用いると

$$<n|p_x|i> = \frac{m}{i\hbar} < n|[\boldsymbol{x}\ ,\ H_0]|i>$$
$$= im\omega_{ni} <n|x|i> \qquad (5.7.21)$$

が得られる．これは双極子演算子の形をしているので，このような近似法を**電気双極子近似**と呼ぶ．ここで双極子の行列要素に対する選択則を思い出そう．[(3.10.39)参照]．$\boldsymbol{x}$ は階数 1 の球面テンソルで $q = \pm 1$ であるから，$m' - m = \pm 1$，$|j' - j| = 0$，1（0→0の遷移はない）でなければならない．$\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}$ を y-軸に沿って取っても，同じ選択則が適用できる．一方，$\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}$ を z-軸に沿って取ると，$q = 0$ であるから $m' = m$ となる．

電気双極子近似を用いると吸収断面積(5.7.14)は，(5.7.19)と(5.7.21)を使って簡単な形をとる［訳注：以下，吸収断面積として励起準位 n の和をとったものを扱う．また $\alpha = e^2/\hbar c \simeq 1/137$ である.］：

$$\sigma_{\text{abs}} = \sum_n 4\pi^2 \alpha\omega_{ni} |<n|x|i>|^2 \delta(\omega - \omega_{ni}) \qquad (5.7.22)$$

すなわち ω の関数として σ_{abs} を見ると，$\hbar\omega$ がエネルギー準位差に対応する $\omega \simeq (E_n - E_i)/\hbar$ のときは，いつも σ_{abs} が δ-関数的な鋭いピークを現わす．いま $|i>$ を基底状態とすると ω_{ni} は必然的に正である．(5.7.22)を積分すると

$$\int \sigma_{\text{abs}}(\omega) d\omega = \sum_n 4\pi^2 \alpha\omega_{ni} |<n|x|i>|^2 \qquad (5.7.23)$$

が得られる．原子物理では**振動子強度** f_{ni} を

$$f_{ni} \equiv \frac{2m\omega_{ni}}{\hbar} |<n|x|i>|^2 \qquad (5.7.24)$$

で定義する．すると（$[x, [x, H_0]]$ を考えると）簡単に**トーマス・ライヒェ・**

クーンの総和則

$$\sum_n f_{ni} = 1 \qquad (5.7.25)$$

が導出できる．[訳注：原子内電子数が N のときは総和則（5.7.25），（5.7.26）を N 倍する.] 吸収断面積の積分で表わすと

$$\int \sigma_{\text{abs}}(\omega)d\omega = \frac{4\pi^2\alpha\hbar}{2m_e} = 2\pi^2 c\left(\frac{e^2}{m_e c^2}\right) \qquad (5.7.26)$$

となる．$\hbar$ が消えている様子に注意しよう．実際まさにこれは古典電磁気学で既に知られていた**振動子総和則**である（例えばJackson 1975を参照）．歴史的に見るとこれは“新しい量子力学”が正しい古典的結果を導いた，最初の一例である．この総和則はハミルトニアンの詳しい形を指定しないで導けたもので，注目に値する．

光電子効果

次に**光電子効果**――すなわち原子が輻射場中に置かれたとき電子が飛び出す効果を考察しよう．この効果の基礎となる過程は，原子の（束縛）状態から連続状態 $E>0$ への遷移と考えられる．したがって $|i\rangle$ は原子状態を表わすケットで，一方 $|n\rangle$ は連続状態を表わすケットである．後者は終状態の電子速度が遅すぎない限り，近似的に平面波の状態 $|\mathbf{k}_f\rangle$ にとることができる。以前の $\sigma_{\text{abs}}(\omega)$ に対する式は今も使えるが，$\delta(\omega_{ni}-\omega)$ には終状態の密度 $\rho(E_n)$ をかけて積分しなければならない．

まず基本的なこととして，単位エネルギー間隔あたりの終状態数を計算しよう．すぐあとで分かるようにこの例題では，行列要素が終状態のエネルギーだけでなく運動量の方向にも依っている．したがって，運動量の方向とエネルギーが共に近い値をもっている終状態をまとめて考えなければならない．

状態数を数えるのに，平面波に対しては箱の中で規格化する従来の方法を用いるのが便利である．一辺 L の立方体の箱の中で波動関数の絶対値の

2乗を積分して1が得られるとき，この平面波は規格化されているとみなす．さらにこの状態は，箱の辺 L の周期で周期的境界条件を満足していると仮定する．すると波動関数は

$$<\boldsymbol{x}|\boldsymbol{k}_f> = \frac{e^{i\boldsymbol{k}_f\cdot\boldsymbol{x}}}{L^{3/2}} \qquad (5.7.27)$$

の形でなければならない．ここで許される k_x の値は n_x を正負の整数として

$$k_x = \frac{2\pi n_x}{L} \qquad (5.7.28)$$

を満たす．同様の制限は k_y，k_z に対しても成り立つ．$L\to\infty$ にすると k_x，k_y，k_z が連続変数になることに，注意しよう．

状態数を数える問題は3次元格子空間中の点の数を数える問題に帰する．n を

$$n^2 = {n_x}^2 + {n_y}^2 + {n_z}^2 \qquad (5.7.29)$$

で定義する．$L\to\infty$ のとき，n を連続変数として取扱うのはよい近似である．実際これはちょうど，格子空間中で原点から引いたベクトルの長さである．原点から引いたベクトルの先が n と $n+dn$ の間で立体角要素 $d\Omega$ の中にあるような微小体積要素を考える．明らかにこの体積は $n^2dnd\Omega$ である．終状態の平面波のエネルギーは，k_f したがって n に関連していて

$$E = \frac{\hbar^2{k_f}^2}{2m_e} = \frac{\hbar^2}{2m_e}\frac{n^2(2\pi)^2}{L^2} \qquad (5.7.30)$$

である．さらに格子空間で原点から引いたベクトルの方向はまさに終状態の運動量の方向であるから，E と $E+dE$ の間で $\boldsymbol{k}_f$ の方向が $d\Omega$ 中にある状態数は $(dE=(\hbar^2k_f/m_e)dk_f$ を用いて)

$$n^2d\Omega\frac{dn}{dE}dE = \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3(k_f)^2\frac{dk_f}{dE}d\Omega dE$$

$$= \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \frac{m_e}{\hbar^2} k_f \, dE d\Omega \tag{5.7.31}$$

で与えられる.* 以上をまとめると光電子効果の微分断面積の表式が得られる：

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{4\pi^2 \alpha \hbar}{m_e^2 \omega} \left| \langle \boldsymbol{k}_f | e^{i(\omega/c)\hat{\boldsymbol{n}}\cdot\boldsymbol{x}} \hat{\boldsymbol{\varepsilon}} \cdot \boldsymbol{p} | i \rangle \right|^2 \frac{m_e k_f L^3}{\hbar^2 (2\pi)^3}. \tag{5.7.32}$$

具体的に K 殻（最内殻）の1個の電子が光を吸収して飛び出していく場合を考えよう．始状態の波動関数は，ボーア半径 a_0 を a_0/Z で置きかえる他は，水素原子の基底状態と本質的に同じである．したがって

$$\begin{aligned} &\langle \boldsymbol{k}_f | e^{i(\omega/c)\hat{\boldsymbol{n}}\cdot\boldsymbol{x}} \hat{\boldsymbol{\varepsilon}} \cdot \boldsymbol{p} | i \rangle \\ &= \hat{\boldsymbol{\varepsilon}} \cdot \int d^3x \frac{e^{-i\boldsymbol{k}_f\cdot\boldsymbol{x}}}{L^{3/2}} e^{i(\omega/c)\hat{\boldsymbol{n}}\cdot\boldsymbol{x}} (-i\hbar\nabla) \left[e^{-Zr/a_0} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \right] \end{aligned} \tag{5.7.33}$$

である．部分積分により ∇ を左側に持っていくことができる．さらに，$\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}$ は $\hat{\boldsymbol{n}}$ と直交するので

$$\hat{\boldsymbol{\varepsilon}} \cdot [\nabla e^{i(\omega/c)(\hat{\boldsymbol{n}}\cdot\boldsymbol{x})}] = 0 \tag{5.7.34}$$

が成り立つ．一方 $e^{-i\boldsymbol{k}_f\cdot\boldsymbol{x}}$ にかかる ∇ により $-i\boldsymbol{k}_f$ がおりてくるが，これは積分の外に取出せる．このようにすると (5.7.33) の値を求めるのに必要なことは，単に原子の波動関数のフーリエ変換を

$$\boldsymbol{q} \equiv \boldsymbol{k}_f - \left(\frac{\omega}{c}\right)\hat{\boldsymbol{n}} \tag{5.7.35}$$

に関して取ることである．最終的な答は（水素原子の波動関数のフーリエ変換については，この章末の問題39を参照）

---

* これは位相空間内の $d^3x d^3p/(2\pi\hbar)^3$ の微小体積あたり1状態をとることと同値である．

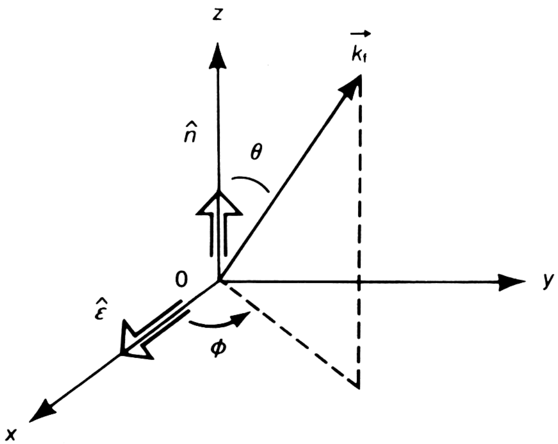


図 5.10. 極座標系で $\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}$, $\hat{\boldsymbol{n}}$, $\boldsymbol{k}_f$ を表わす. $\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}$ と $\hat{\boldsymbol{n}}$ はそれぞれ $0x$ 方向, $0z$ 方向にあり, $\boldsymbol{k}_f=(k_f\sin\theta\cos\phi,\ k_f\sin\theta\sin\phi,\ k_f\cos\theta)$ である.

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}=32e^2k_f\frac{(\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}\cdot\boldsymbol{k}_f)^2}{mc\omega}\frac{Z^5}{{a_0}^5}\frac{1}{[(Z/a_0)^2+q^2]^4} \tag{5.7.36}$$

となる. 座標系を図5.10に示すようにとると, 微分断面積を θ と ϕ を用いて書くことができる. その際に

$$\begin{aligned}(\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}\cdot\boldsymbol{k}_f)^2&={k_f}^2\sin^2\theta\cos^2\phi\\ q^2&={k_f}^2-2k_f\frac{\omega}{c}\cos\theta+\left(\frac{\omega}{c}\right)^2\end{aligned} \tag{5.7.37}$$

の関係を用いる.

5.8 エネルギーのずれと崩壊による幅

今までは, 始状態以外の状態がどのように占められていくかという問題に限って考察してきた. すなわち $n\neq i$ の係数 $c_n(t)$ の時間的発展を扱っていたのである. では $c_i(t)$ それ自身には何が起こるであろうか.

ハミルトニアンの突然の変化の効果を避けるため，摂動を非常にゆっくりと増加させることにしよう．遠い過去 ($t\to-\infty$) に時間に依存するポテンシャルはゼロであったと仮定する．それからゆっくりと摂動を入れていき最後に完全な値を取らせる．それには

$$V(t)=e^{\eta t}V \tag{5.8.1}$$

と置き，V を一定とし η は正の小さな量とする．計算の終りに $\eta\to0$ とするとポテンシャルは常に一定となる (図5.11を見よ).

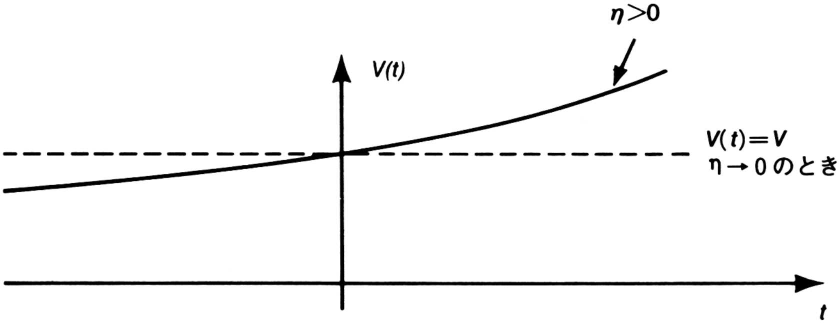


図 5.11. 断熱的に（ゆっくりと）入れる $V(t)$ を t の関数として表わした曲線.

遠い過去で時間を $-\infty$ に取り，その時の状態ケットが相互作用表示で $|i\rangle$ であったと仮定する．我々の目標は $c_i(t)$ を計算することである．しかしその前にいつもの黄金則の式 (5.6節を見よ) が，このゆっくりと摂動を入れる方法で再現できることを確かめよう．$n\neq i$ の $c_n(t)$ に対しては [(5.6.17)を用いて]

$$c_n^{(0)}(t)=0,$$

$$c_n^{(1)}(t)=\frac{-i}{\hbar}V_{ni}\lim_{t_0\to-\infty}\int_{t_0}^{t}e^{\eta t'}e^{i\omega_{ni}t'}dt'$$

$$=\frac{-i}{\hbar}V_{ni}\frac{e^{\eta t+i\omega_{ni}t}}{\eta+i\omega_{ni}} \tag{5.8.2}$$

が成り立つ．したがって最低次で遷移確率は

$$|c_n(t)|^2 \simeq \frac{|V_{ni}|^2}{\hbar^2}\frac{e^{2\eta t}}{\eta^2+\omega_{ni}{}^2} \tag{5.8.3}$$

すなわち

$$\frac{d}{dt}|c_n(t)|^2 \simeq \frac{2|V_{ni}|^2}{\hbar^2}\left(\frac{\eta e^{2\eta t}}{\eta^2+\omega_{ni}{}^2}\right) \tag{5.8.4}$$

により与えられる．次に $\eta \to 0$ としよう。明らかに $e^{\eta t}$ を1で置き換えて差支えない．一方

$$\lim_{\eta\to 0}\frac{\eta}{\eta^2+\omega_{ni}^2} = \pi\delta(\omega_{ni}) = \pi\hbar\,\delta(E_n - E_i) \tag{5.8.5}$$

に注目しよう．この式によって黄金則

$$w_{i\to n} \simeq \left(\frac{2\pi}{\hbar}\right)|V_{ni}|^2\delta(E_n - E_i) \tag{5.8.6}$$

が導ける．この結果に自信を持って，再び(5.6.17)を用いて $c_i^{(0)}$, $c_i^{(1)}$ および $c_i^{(2)}$ を計算すると

$$c_i^{(0)} = 1$$

$$c_i^{(1)} = \frac{-i}{\hbar}V_{ii}\lim_{t_0\to-\infty}\int_{t_0}^{t}e^{\eta t}dt' = \frac{-i}{\hbar\eta}V_{ii}e^{\eta t}$$

$$\begin{aligned} c_i^{(2)} &= \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^2\sum_m|V_{im}|^2\lim_{t_0\to-\infty}\int_{t_0}^{t}dt'e^{i\omega_{mi}t'+\eta t'}\frac{e^{i\omega_{im}t'+\eta t'}}{i(\omega_{mi}-i\eta)} \\ &= \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^2|V_{ii}|^2\frac{e^{2\eta t}}{2\eta^2} + \left(\frac{-i}{\hbar}\right)\sum_{m\neq i}\frac{|V_{mi}|^2e^{2\eta t}}{2\eta(E_i-E_m+i\hbar\eta)} \end{aligned} \tag{5.8.7}$$

となる．このように2次までとると

$$c_i(t) \simeq 1 - \frac{i}{\hbar\eta} V_{ii} e^{\eta t} + \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^2 |V_{ii}|^2 \frac{e^{2\eta t}}{2\eta^2} + \left(\frac{-i}{\hbar}\right) \sum_{m \neq i} \frac{|V_{mi}|^2 e^{2\eta t}}{2\eta(E_i - E_m + i\hbar\eta)} \tag{5.8.8}$$

が得られる．次に c_i の時間微分 $[dc_i(t)/dt \equiv \dot{c}_i]$ を考えよう．これは(5.8.8)から求まるが c_i で割り $\eta \to 0$ とすると（つまり $e^{\eta t}$ と $e^{2\eta t}$ を1で置き換えると）

$$\frac{\dot{c}_i}{c_i} \simeq \frac{\dfrac{-i}{\hbar} V_{ii} + \left(\dfrac{-i}{\hbar}\right)^2 \dfrac{|V_{ii}|^2}{\eta} + \left(\dfrac{-i}{\hbar}\right) \displaystyle\sum_{m \neq i} \frac{|V_{mi}|^2}{E_i - E_m + i\hbar\eta}}{1 - \dfrac{i}{\hbar} \dfrac{V_{ii}}{\eta}}$$

$$\simeq \frac{-i}{\hbar} V_{ii} + \frac{-i}{\hbar} \sum_{m \neq i} \frac{|V_{mi}|^2}{E_i - E_m + i\hbar\eta} \tag{5.8.9}$$

となる．展開(5.8.9)は形式的に V の2次まで正しい．ここで $\dot{c}_i(t)/c_i$ が t に依存していないことに注意しよう．等式(5.8.9)はすべての時間に対して成り立つ微分方程式なのである．この式を得た後に c_i を $c_i(0) = 1$ と再規格化しておくと便利である．ここで試みに

$$c_i(t) = e^{-i\Delta_i t/\hbar}, \qquad \frac{\dot{c}_i(t)}{c_i(t)} = \frac{-i}{\hbar} \Delta_i \tag{5.8.10}$$

と置いてみる．Δ_i は（時間について）一定であるが，実数である必要はない．右辺が一定である(5.8.10)は明らかに(5.8.9)と矛盾しない．相互作用表示での $e^{-i\Delta_i t/\hbar}|i\rangle$ はシュレーディンガー表示では $e^{-i\Delta_i t/\hbar - iE_i t/\hbar}|i\rangle$ を意味していることに注目すると，Δ_i の物理的意味が分かる．すなわち摂動の結果は

$$E_i \to E_i + \Delta_i \tag{5.8.11}$$

となっている．つまり我々は時間を含む摂動論を使ってレベルのずれを計算していたのである．次にいつものように

$$\Delta_i = \Delta_i^{(1)} + \Delta_i^{(2)} + \cdots\cdots \tag{5.8.12}$$

と展開し，(5.8.10)を(5.8.9)と比較する．1次では

$$\Delta_i^{(1)} = V_{ii} \tag{5.8.13}$$

であるが，これはちょうど時間を含まない摂動論から期待される結果である．$\Delta_i^{(2)}$ を調べる前に

$$\lim_{\epsilon\to 0}\frac{1}{x+i\varepsilon} = \mathrm{Pr.}\,\frac{1}{x} - i\pi\delta(x) \tag{5.8.14}$$

の式を思い出そう．これを用いると

$$\mathrm{Re}\,(\Delta_i^{(2)}) = \mathrm{Pr.}\sum_{m\neq i}\frac{|V_{mi}|^2}{E_i - E_m} \tag{5.8.15a}$$

$$\mathrm{Im}\,(\Delta_i^{(2)}) = -\pi\sum_{m\neq i}|V_{mi}|^2\delta(E_i - E_m) \tag{5.8.15b}$$

となる．ここで (5.8.15b) の右辺も黄金則から見なれた式であり，これを

$$\sum_{m\neq i} w_{i\to m} = \frac{2\pi}{\hbar}\sum_{m\neq i}|V_{mi}|^2\delta(E_i - E_m) = -\frac{2}{\hbar}\,\mathrm{Im}\,[\Delta_i^{(2)}] \tag{5.8.16}$$

のように結びつけることができる．$c_i(t)$ に戻ると(5.8.10)を

$$c_i(t) = \exp\left[-\left(\frac{i}{\hbar}\right)\mathrm{Re}\,(\Delta_i)t + \frac{1}{\hbar}\,\mathrm{Im}\,(\Delta_i)\,t\right] \tag{5.8.17}$$

と書ける．ここで Γ_i を

$$\frac{\Gamma_i}{\hbar} \equiv -\frac{2}{\hbar}\,\mathrm{Im}\,(\Delta_i) \tag{5.8.18}$$

のように定義すると

$$|c_i(t)|^2 = e^{2\mathrm{Im}(\Delta_i)t/\hbar} = e^{-\Gamma_i t/\hbar} \tag{5.8.19}$$

となる．すなわち Γ_i は状態が $|i\rangle$ が消滅する割合を特徴づけている．

確率の保存則を t の小さいとき V の2次まで確かめておこう：

$$|c_i(t)|^2+\sum_{m\neq i}|c_m(t)|^2=1-\Gamma_i t/\hbar+\sum_{m\neq i}w_{i\to m}t=1. \qquad (5.8.20)$$

ここで(5.8.16)を用いた．すなわち始状態を見い出す確率と他のすべての状態を見い出す確率は，合わせて1となる．いいかえれば状態 $|i\rangle$ が減った分は，$|i\rangle$ 以外の状態の増加で補われている．

以上を要約しよう．エネルギーのずれの実数部は，レベルのずれとふつういっているものである．エネルギーのずれの虚数部は，－2の因子は別にして[(5.8.18)を見よ]，**崩壊による幅**である．また

$$\frac{\hbar}{\Gamma_i}=\tau_i \qquad (5.8.21)$$

とも書くことにしよう。この τ_i は

$$|c_i|^2=e^{-t/\tau_i} \qquad (5.8.22)$$

であるから，状態 $|i\rangle$ の平均寿命である．なぜ Γ_i を幅と呼ぶかは，フーリエ分解

$$\int f(E)e^{-iEt/\hbar}dE=\exp\left[-i\left\{E_i+\mathrm{Re}\,(\Delta_i)\right\}\frac{t}{\hbar}-\frac{\Gamma_i t}{2\hbar}\right] \qquad (5.8.23)$$

を調べると分かる．フーリエ反転公式を用いると

$$|f(E)|^2\propto\frac{1}{\{E-[E_i+\mathrm{Re}\,(\Delta_i)]\}^2+\Gamma_i^2/4} \qquad (5.8.24)$$

が得られる．したがって Γ_i は $|f(\mathrm{E})|^2$ の高さが最高値の半分になるときの普通の意味での幅（全幅）である．(5.8.21)から時間とエネルギーの間の不確定関係

$$\Delta t\,\Delta E\sim\hbar \qquad (5.8.25)$$

が得られることに注意しよう．ここでエネルギーの不確定さを Γ_i と同一視し，平均寿命を Δt と同一視した．

エネルギーのずれと崩壊による幅の問題を，(5.8.1)の $\eta\to 0$ 極限で得られる時間的に一定な摂動 V を用いて論じたが，我々の考察は5.6節で議論した調和摂動の場合にも，容易に一般化できる．そのとき必要なことは，(5.8.2)，(5.8.8)，(5.8.15)などで

$$E_{n(m)}-E_i\to E_{n(m)}-E_i\pm\hbar\omega \tag{5.8.26}$$

の置きかえだけである．ここで展開した不安定状態に関する量子力学的記述は，ウィグナーとワイスコップによって1930年にはじめられたものである．

問　題

1．調和振動子（1次元）が摂動

$$\lambda H_1=bx$$

を受ける．b は実数定数である．

a．基底状態のエネルギーのずれを有限な答を与える最低次まで計算せよ．

b．この問題を厳密に解き，(a) で得た結果と比較せよ．[証明せずに

$$\langle u_{n'}\mid x\mid u_n\rangle=\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(\sqrt{n+1}\,\delta_{n',n+1}+\sqrt{n}\,\delta_{n',n-1}\right)$$

を仮定してよい.]

2．縮退がなく時間を含まない摂動論で，摂動を受けたエネルギー固有状態 $|k>$ の中に対応する無摂動固有状態 $|k^{(0)}>$ を見出す確率はいくらか．これを g^2（摂動の2次）の項まで求めよ．

3．2次元ポテンシャル

$$V_0 = \begin{cases} 0, & 0 \le x \le L \text{ かつ } 0 \le y \le L \\ \infty, & \text{他の場合} \end{cases}$$

の中の粒子を考察する．基底状態および第1励起状態のエネルギー固有関数を表わせ．次に

$$V_1 = \begin{cases} \lambda xy, & 0 \le x \le L \text{ かつ } 0 \le y \le L \\ 0, & \text{他の場合} \end{cases}$$

の形の時間に依らない摂動を加えた．基底状態および第1励起状態に対して，ゼロ次のエネルギー固有関数と，1次のエネルギー変化を求めよ．

4．2次元の等方的調和振動子を考える．このハミルトニアンは

$$H_0 = \frac{p_x{}^2}{2m} + \frac{p_y{}^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}(x^2 + y^2)$$

で与えられる．

a．低い方から3番目までの状態のエネルギーはいくらか．縮退はあるか．

b．次に摂動

$$V = \delta m\omega^2 xy$$

をかける．ここで δ は1よりずっと小さい無次元の実数である．低い方から3番目までのそれぞれの状態に対して，ゼロ次のエネルギー固有ケットと対応する1次のエネルギー［すなわち，(a) で得た無摂動エネルギーに，1次のエネルギーのずれを加えたもの］を見い出せ．

c．ハミルトニアンが $H_0 + V$ の問題を厳密に解け．これを (b) で得た摂動の結果と比較せよ．

$$[\langle n' \mid x \mid n \rangle = \sqrt{\hbar / 2m\omega}\,(\sqrt{n+1}\;\delta_{n', n+1} + \sqrt{n}\;\delta_{n', n-1})$$

を用いてよい.］

5．(5.1.50) によって与えられる1次元調和振動子に，摂動 $V=\frac{1}{2}\varepsilon m\omega^2x^2$ が加わったとき，(5.1.54) 式が成り立つことを確かめよ．他の行列要素 V_{k0} はすべてゼロになることを示せ.

6．二つの対称的な長方形の井戸型ポテンシャル

$$V=\begin{cases}\infty, & |x|>a+b\\ 0, & a<|x|<a+b\\ V_0\,(>0), & |x|<a\end{cases}$$

を考える．V_0 が低励起状態の量子化エネルギーにくらべて非常に高いとして，最もエネルギーが低い二つの状態間のエネルギー間隔を表わす近似的な表式を求めよ.

7．基底状態に縮退のない一電子原子が，z-方向の一様な電場中に置かれている．基底状態で誘起された電気双極子モーメントを表わす近似的表式を，摂動の1次まで計算した状態ベクトルに関する ez の期待値から求めよ．同じ表式が，2次まで計算した基底状態のエネルギー変化 $\Delta=-\alpha|\boldsymbol{E}|^2/2$ からも得られることを示せ．（注：α は分極率を表わす.）スピンは無視せよ.

8．下記の行列要素（あるいは期待値）を計算せよ．もしそれがゼロになるときは，なぜゼロになったかを簡単な対称性の（または他の）議論を用いて説明せよ.

a．$\langle n=2,\ l=1,\ m=0\,|\,x\,|\,n=2,\ l=0,\ m=0\rangle$.

b．$\langle n=2,\ l=1,\ m=0\,|\,p_z\,|\,n=2,\ l=0,\ m=0\rangle$.

［(a)，(b) で $|n\,l\,m>$ は，スピンを無視した非相対論的水素原子のエネルギ固有ケットを表わす.］

c．中心力の場の中にある $j=9/2$, $m=7/2$, $l=4$ の電子の $\langle L_z \rangle$.

d．s-状態のポジトロニウムに対して

$\langle$一重項, $m_s=0\,|\,(S_z^{(e-)}-S_z^{(e+)})\,|\,$三重項, $m_s=0\rangle$.

e．水素分子の基底状態に対して $\langle \boldsymbol{S}^{(1)}\cdot\boldsymbol{S}^{(2)}\rangle$.

9．$|\,n,\ l=1,\ m=\pm 1,\ 0\rangle$（スピンは無視）で表わされる p-軌道の電子が，ポテンシャル

$$V=\lambda(x^2-y^2) \qquad (\lambda=\text{一定})$$

を受けている．

a．この摂動を対角化する“正しい”ゼロ次のエネルギー固有状態を求めよ．エネルギーの変化を詳しく計算する必要はないが，はじめの三重縮退がいま完全に解けていることを示せ．

b．V は時間反転の下で不変であり，もはや縮退は全くないから，(a) で得られたエネルギー固有状態の各々は時間反転操作を受けると，（位相因子ないし符号は別にして）自分自身に移ることが期待される．この点を具体的に確かめよ．

10．2次元の無限に深い四角な井戸型ポテンシャル

$$V=\begin{cases}0, & 0\le x\le a,\ 0\le y\le a\\ \infty, & \text{他の場合}\end{cases}$$

の中にあるスピンのない粒子を考察する．

a．下から3番目までの状態のエネルギー固有値はいくらか．縮退はあるか．

b．次にポテンシャル

$$V_1=\lambda xy,\quad 0\le x\le a,\ 0\le y\le a$$

を加える．これを弱い摂動として以下の問に答えよ．

(i) 三つの状態のそれぞれについて，摂動によるエネルギー変化は λ に関して1次か2次か.

(ii) 下から3番目までの状態のエネルギー変化に対する表式を，λ のオーダーまで正確に求めよ.（現われる積分を計算する必要はない.）

(iii) この三つのエネルギー状態に対して，摂動があるときとないときのエネルギーの図を描け．どの無摂動状態が，どの摂動状態と結びつくかが明らかになるように注意せよ.

11. 二準位系のハミルトニアン行列は

$$\mathscr{H} = \begin{pmatrix} E_1^0 & \lambda\Delta \\ \lambda\Delta & E_2^0 \end{pmatrix}$$

のように表わすことができる．摂動のない問題（$\lambda = 0$）に対するエネルギー固有関数は，明らかに

$$\phi_1^{(0)} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \phi_2^{(0)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

で与えられる.

a．この問題を厳密に解き，エネルギー固有関数 ψ_1，ψ_2 とエネルギー固有値 E_1，E_2 を見い出せ.

b．$\lambda|\Delta| \ll |E_1^0 - E_2^0|$ を仮定し，同じ問題を時間を含まない摂動論を用いて解け．エネルギー固有関数については1次まで，エネルギー固有値については2次まで求めよ．(a)で求めた厳密な結果と比較せよ.

c．二つの無摂動エネルギーが“ほとんど縮退”している，すなわち

$$|E_1^0 - E_2^0| \ll \lambda|\Delta|$$

であると仮定しよう．(a) で得られた厳密な結果は，E_1^0 を厳密に

E_2^0 と等しく置き，この問題に縮退のある摂動論を適用したとき期待できる解と，よく似ていることを示せ.

12. (この問題は1番目と2番目の状態間の縮退が，1次では解けないので扱いにくい問題である．Gottfried 1966, p. 397，問題1も参照せよ.）この問題は Schiff 1968, p. 295，問題4から転用した．三つの無摂動状態を持つ系が，摂動を受けたハミルトニアン行列

$$\begin{pmatrix} E_1 & 0 & a \\ 0 & E_1 & b \\ a^* & b^* & E_2 \end{pmatrix}$$

で表わされている．ここで $E_2 > E_1$ とする．a，b は同じ程度の量で $E_2 - E_1$ に較べて小さく，摂動と見なすことができる．縮退のない2次の摂動論を用いて，摂動を受けた固有値を計算せよ．（これは正しい手続きか？）次に行列を対角化して厳密な固有値を見出せ．最後に縮退のある2次の摂動論を用いよ．得られた三つの結果を比較せよ．

13. 水素の $2S_{1/2}$ 準位と $2P_{1/2}$ 準位に対してシュタルク効果を計算せよ．電場 ε は十分に弱く $e\varepsilon a_0$ は微細構造と較べて小さいとするが，ラムシフト δ ($\delta = 1057$ MHz）は考慮する．（すなわち，この計算で $2P_{3/2}$ を無視する．）$e\varepsilon a_0 \ll \delta$ のときエネルギー変化は ε の2次であり，一方 $e\varepsilon a_0 \gg \delta$ のときは ε の1次であることを示せ．（必要な動径積分は $\langle 2s|r|2p\rangle = 3\sqrt{3}\,a_0$ である.）この問題に関して時間反転の結果が現われていれば述べよ．この問題は Gottfried 1966, 問題7-3から転用した.

14. 水素原子の $n = 3$ の準位に対して，有限な解を与える最低次でシュタルク効果を計算せよ．スピン-軌道相互作用や相対論的補正（ラムシフト）は無視して，有限な値になる最低次のエネルギー変化の他に，対応するゼロ次の固有ケットも求めよ.

15. 電子がスピン磁気モーメントに類似な，非常に小さな固有の電気双極子モーメント（すなわち $\boldsymbol{\sigma}$ に比例している $\boldsymbol{\mu}_{el}$）を持っていると仮定しよう．仮想的な相互作用 $-\boldsymbol{\mu}_{el}\cdot\boldsymbol{E}$ を弱い摂動として扱い，外部電磁場がないとき Na 原子（$Z = 11$）のエネルギー準位がどのように変化するか，定性的に議論せよ．準位のずれは 1 次か 2 次か．どの状態が互いに混合するか，具体的に述べよ．摂動の影響を受ける最低準位のエネルギー変化に対する表式を求めよ．この問題全体を通じて，価電子だけが仮想的な相互作用を受けていると仮定せよ．

16. 球対称ポテンシャル $V(r)$ によりある固定した中心に束縛されている粒子を考える．

a．基底状態にせよ励起状態にせよ，すべての s-状態に対して

$$|\psi(0)|^2 = \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right)\left\langle\frac{dV}{dr}\right\rangle$$

であることを証明せよ．

b．この関係式を，3 次元等方調和振動子や水素原子などの基底状態に対して確かめよ．（ノート：この関係式は，クォークと反クォークの間のポテンシャルの形を推測するのに実際に有効であることが分かっている．）

17. a．回転軸と垂直方向の磁場中にある剛体回転子のハミルトニアンが，磁場の 2 次の項を無視して

$$AL^2 + BL_z + CL_y$$

の形であると仮定する（Merzbacher 1970, 問題17-1）．$B \gg C$ として摂動論を用い，エネルギー固有値の近似値を有限な解を与える最低次で求めよ．

b．一電子原子（例えばアルカリ原子）の行列要素

$$\langle n'l'm_l'm_s'|(3z^2-r^2)|n\,l\,m_l\,m_s\rangle,$$
$$\langle n'l'm_l'm_s'|xy|n\,l\,m_l\,m_s\rangle$$

を考える．Δl，Δm_l および Δm_s の選択則を表わせ．答が正しいことを示せ．

18. 基底状態にある水素原子 $[\langle \boldsymbol{x}|0\rangle=(1/\sqrt{\pi a_0^3})e^{-r/a_0}]$ に対して，ハミルトニアンの中でふつう無視している $e^2\boldsymbol{A}^2/2m_ec^2$ の項を1次摂動で取り入れ，2次のゼーマン効果を計算せよ．エネルギー変化を

$$\Delta=-\frac{1}{2}\chi\boldsymbol{B}^2$$

と表わし，反磁性帯磁率 χ の表式を求めよ．（次の定積分

$$\int_0^\infty e^{-\alpha r}r^n dr=\frac{n!}{\alpha^{n+1}}$$

が役立つであろう．）

19. （Merzbacher 1970, p. 448, 問題11.）ヘリウムの波動関数として変分法で求められた

$$\psi(\boldsymbol{x}_1,\ \boldsymbol{x}_2)=(Z_{\rm eff}^3/\pi a_0^3)\exp\left[\frac{-Z_{\rm eff}(r_1+r_2)}{a_0}\right],$$

$Z_{\rm eff}=2-5/16$ を用いよ．［訳注：（6.4.13）～（6.4.15）参照．］反磁性帯磁率の測定値は，$-1.88\times10^{-6}\mathrm{cm^3/mol}$ である．

原子がベクトルポテンシャル $\boldsymbol{A}=\frac{1}{2}\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{r}$ で表わされる一様な磁場中にあるとして，磁場中の原子内電子を表わすハミルトニアンを用い，角運動量がゼロの状態におけるエネルギー変化を，B^2 のオーダーで定めよ．

原子の反磁性帯磁率 χ を $E=-\frac{1}{2}\chi B^2$ で定義して，基底状態にあるへ

リウム原子の χ を計算し測定値の結果と比較せよ.

20. 1次元調和振動子の基底状態のエネルギーを, β をパラメータとした試行関数

$$\langle x|\tilde{0}\rangle = e^{-\beta|x|}$$

を用いて算出せよ. ($\int_0^\infty e^{-\alpha x}x^n dx = n!/\alpha^{n+1}$ を使うとよい.)

21. 微分方程式

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + (\lambda - |x|)\psi = 0,$$

$$|x| \to \infty \text{ に対して } \quad \psi \to 0$$

の最低固有値 (λ) を, 試行関数として

$$\psi = \begin{cases} c(a - |x|), & |x| < a \\ 0 & |x| > a \end{cases} \quad (a : \text{変分パラメータ})$$

を用いた変分法により算出せよ. (注意: $d\psi/dx$ は $x = 0$ で不連続である.) この問題を解くのに以下の数値のデータが役立つであろう:

$$3^{1/3} = 1.442,\ 5^{1/3} = 1.710,\ 3^{2/3} = 2.080,$$

$$\pi^{2/3} = 2.145$$

なお最低固有値の厳密な値は 1.019 であることが示せる.

22. 古典的角振動数が ω_0 である1次元調和振動子を考える. この系は $t<0$ で基底状態にあることが分かっている. $t>0$ では時間依存性のあるポテンシャル

$$V(t) = F_0 x \cos\omega t$$

が加わる. ここで F_0 は空間的にも時間的にも一定値である. 時間を含む

摂動論を用い有限な解を与える最低次で期待値 $\langle x \rangle$ の表式を時間の関数として求めよ．この手続きは $\omega \simeq \omega_0$ のときも有効か．[$\langle n'|x|n \rangle = \sqrt{\hbar/2m\omega_0}\,(\sqrt{n+1}\,\delta_{n',n+1} + \sqrt{n}\,\delta_{n',n-1})$ を用いるとよい．]

23. 1次元調和振動子が，$t<0$ で基底状態にあった．$t \geq 0$ でこの系に時間依存性はあるが空間的には一様な力（ポテンシャルではない）

$$F(t) = F_0 e^{-t/\tau}$$

が x-方向にかかった．

a．時間を含む1次の摂動論を用い，$t>0$ で振動子が第1励起状態に見い出される確率を求めよ．$t \to \infty$（τ は有限）の極限で，この結果は時間に依らないことを示せ．これはもっともな結果か，意外な結果か．

b．これより高い励起状態に見出されることはあるか．

[$\langle n'|x|n \rangle = \sqrt{\hbar/2m\omega}\,(\sqrt{n}\,\delta_{n',n-1} + \sqrt{n+1}\,\delta_{n',n+1})$ を用いるとよい．]

24. 調和振動子のポテンシャルに束縛された粒子を考える．はじめ（$t<0$）この粒子は基底状態にあった．$t=0$ で

$$H'(x, t) = Ax^2 e^{-t/\tau}$$

の形の摂動が加わった．時間を含む摂動論を用いて，十分に長い時間（$t \gg \tau$）がたったのち，系がある与えられた励起状態に遷移している確率を計算せよ．すべての終状態を考えよ．

25. 二準位系の無摂動ハミルトニアンが

$$H_0 = \begin{pmatrix} E_1^0 & 0 \\ 0 & E_2^0 \end{pmatrix}$$

で表わされている．これに時間に依存する摂動

$$V(t) = \begin{pmatrix} 0 & \lambda\cos\omega t \\ \lambda\cos\omega t & 0 \end{pmatrix} \qquad (\lambda = \text{実数})$$

が加わるとする．

a．$t=0$ で系は $\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$ で表わされる一番目の状態にあることが分かっている．時間を含む摂動論を用い，$E_1^0-E_2^0$ が $\pm\hbar\omega$ に近くないことを仮定して，系が $\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$ で表わされる2番目の状態に見い出される確率の表式を，時間 $t\,(t>0)$ の関数として導け．

b．$E_1^0-E_2^0$ が $\pm\hbar\omega$ に近いとき，この手続きはなぜ有効でないのか．

26. 角振動数 ω の1次元調和振動子に，空間的に一様であるが時間に依存する力（ポテンシャルではない）

$$F(t)=\frac{F_0\tau/\omega}{\tau^2+t^2}, \qquad -\infty<t<\infty$$

が作用している．$t=-\infty$ で振動子は基底状態にあったことが分かっている．時間を含む1次の摂動論を用い，$t=+\infty$ で振動子が第1励起状態に見い出される確率を計算せよ．

上級者向問題：$F(t)$ は振動子に与えられる力積

$$\int F(t)dt$$

が常に一定であるように——つまり τ に依らないように——規格化してある．しかし $\tau\gg1/\omega$ とすると，励起する確率は実際上無視できる．これはもっともであろうか．［x の行列要素：$\langle n'|x|n\rangle=(\hbar/2m\omega)^{1/2}\times(\sqrt{n}\,\delta_{n',n-1}+\sqrt{n+1}\,\delta_{n',n+1})$］

27. 時間に依存しないポテンシャルの影響下で，1次元的運動をしている粒子を考える．この問題でエネルギー準位と対応する固有関数は，分かっていると仮定する．いまこの粒子に，時間に依存するポテンシャル

$$V(t)=A\delta(x-ct)$$

で表わされる進行パルスをかけた.

a. $t=-\infty$ で粒子は基底状態にあり，エネルギー固有関数は $\langle x|i\rangle = u_i(x)$ であることが分かっていたとする. $t=+\infty$ で，系がエネルギー固有関数 $\langle x|f\rangle = u_f(x)$ を持つ，ある励起状態に見い出される確率を求めよ.

b. (a) で得た結果を，δ-関数のパルスとは調和摂動（harmonic perturbations）の重ね合せとして見なせることを用いて，物理的に解釈せよ.

$$\delta(x-ct)=\frac{1}{2\pi c}\int_{-\infty}^{\infty}d\omega\, e^{i\omega[x/c-t]}$$

を思い出せ. 摂動が非常に長い時間にわたってかかっている限り，量子力学的にも成立するエネルギー保存則の役割を強調せよ.

28. 基底状態 $[(n,l,m)=(1,0,0)]$ にある水素原子が，コンデンサーの平板の間に置かれている. 時間に依存するが空間的には一様な電場（ポテンシャルではない）が，次のようにかけられた：

$$\boldsymbol{E}=\begin{cases}0 & t<0 \text{ に対して,}\\ \boldsymbol{E}_0 e^{-t/\tau} & t>0 \text{ に対して}\end{cases}$$

（$\boldsymbol{E}_0$ は z-軸の正方向を向いている）

時間を含む1次の摂動論を用いて，$t\gg\tau$ で原子が三種の $2p$ 状態 $(n,l,m)=(2,1,\pm1$ または $0)$ のそれぞれに見い出される確率を計算せよ. 同じ問題を $2s$ 状態 $(n,l,m)=(2,0,0)$ に対しても解け. 動径積分の計算を試みる必要はないが，他の（角度と時間に関する）積分はすべて実行せよ.

29. 2個のスピン 1/2 の構成要素からなる複合系を考える. $t<0$ ではハミルトニアンはスピンに依存せず，エネルギーの尺度を適当に合わせるとゼロにとることができる. $t>0$ ではハミルトニアンは

$$H=\left(\frac{4\Delta}{\hbar^2}\boldsymbol{S}_1\cdot\boldsymbol{S}_2\right)$$

で与えられる．$t \leq 0$ で系が $|+-\rangle$ の状態にあったとする．系が $|++\rangle$，$|+-\rangle$，$|-+\rangle$ および $|--\rangle$ の状態のそれぞれに見い出される確率を，時間の関数として次のようにして求めよ．

a．問題を厳密に解くことにより．

b．時間を含む1次の摂動論が使えると仮定し，H を $t=0$ で入れられた摂動として問題を解くことにより．

どのような条件のとき，(b) は正しい結果を与えるか．

30. $E_1 < E_2$ の2準位系を考える．2準位を結ぶ時間に依存する次のようなポテンシャルがある：

$$V_{11} = V_{22} = 0,\quad V_{12} = \gamma e^{i\omega t},\quad V_{21} = \gamma e^{-i\omega t} \qquad (\gamma \text{ は実数}).$$

$t=0$ では下の準位のみに状態が分布していたこと――すなわち $c_1(0)=1$，$c_2(0)=0$――が分かっている．

a．$t>0$ での $|c_1(t)|^2$，$|c_2(t)|^2$ を，連立微分方程式

$$i\hbar \dot{c}_k = \sum_{n=1}^{2} V_{kn}(t)\, e^{i\omega_{kn}t} c_n \qquad (k = 1, 2)$$

を厳密に解いて求めよ．$[\omega_{21} \equiv (E_2 - E_1)/\hbar]$

b．同じ問題を時間を含む摂動論を用い，有限な解を与える最低次の次数で解け．この二つの方法を，γが小さい値のとき比較せよ．次の二つの場合を別々に扱え：(i) ω が ω_{21} と非常に異なる場合，(ii) ω が ω_{21} と近い場合

(a) の場合の答：（ラビの公式）

$$|c_2(t)|^2 = \frac{\gamma^2/\hbar^2}{\gamma^2/\hbar^2 + (\omega - \omega_{21})^2/4} \sin^2\left\{\sqrt{\frac{\gamma^2}{\hbar^2} + \frac{(\omega - \omega_{21})^2}{4}}\, t\right\},$$

$$|c_1(t)|^2 = 1 - |c_2(t)|^2$$

31. ゆっくりと摂動を入れていくと（$V \to Ve^{\eta t}$とすると），(5.6.36) 式の第2

項の寄与を算出できることを示せ（Baym 1969, p. 257).

32. a．第3章問題3で解いたポジトロニウムの問題を考える．z-軸に沿って均一な静磁場があるとき，ハミルトニアンは

$$H = A\boldsymbol{S}_1 \cdot \boldsymbol{S}_2 + \left(\frac{eB}{m_e c}\right)(S_{1z} - S_{2z})$$

で与えられる．縮退がなく時間を含まない摂動論を用いて（ハミルトニアン行列を対角化する代りに）この問題を解き，四つのすべての状態のエネルギー準位を求めよ．H の表式の第1項と第2項を，それぞれ H_0 と V と見なせ．求めた結果を厳密な表式

$$E = -\left(\frac{\hbar^2 A}{4}\right)\left[1 \pm 2\sqrt{1+4\left(\frac{eB}{m_e c \hbar A}\right)^2}\right],$$

$$\left\{\begin{matrix} \text{一重項} & m=0 \\ \text{三重項} & m=0 \end{matrix}\right\} \text{に対して}$$

$$E = \frac{\hbar^2 A}{4}, \qquad \text{三重項} \quad m = \pm 1 \text{ に対して}$$

と比較せよ．ここで三重項（一重項）$m = 0$ とは，$B \to 0$ のとき $m = 0$ の純粋な三重項（一重項）になる状態を表わす．

b．いまこの二つの $m = 0$ の状態間に，“適切な”振動数の振動磁場をかけることにより（誘導放出か吸収を通じて）遷移を起こさせようとする．磁場を z-軸方向にかけなければいけないか，それとも x-軸（y-軸）方向にかけなければいけないか．選んだ答が正しいことを示せ．（はじめからある静磁場は，ずっと z-軸に沿っていると仮定する．）

33. 励起された原子による光子の自発放出を考える．この過程は $E1$ 遷移であることがわかっている．原子の磁気量子数は1単位だけ減少すると仮定しよう．放出光子の角度分布はどのようになるか．また光子の偏極を，全体（原子と光子）の系に対する角運動量保存に注意して議論せよ．

34. 1個の電子と電荷1（$Z = 1$）の三重水素核（^{3}H）からできた原子を考え

る．はじめ，系は基底状態（$n=1$, $l=0$）にあった．核の電荷が1単位だけ急に増加した（現実には1個の電子と1個の反ニュートリノを放出した）と仮定しよう．これは三重水素核が質量3のヘリウム核（$Z=2$, ^{3}He）に変換したことを意味する．この系が新しいヘリウムイオンの基底状態に見出される確率を求めよ．水素の波動関数は

$$\psi_{n=1,l=0}(\boldsymbol{x})=\frac{1}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}e^{-Zr/a_0}$$

で与えられる．

35. 水素原子の基底状態（$n=1$, $l=0$）が，時間に依存する次のようなポテンシャルを受ける：

$$V(\boldsymbol{x},t)=V_0\cos(kz-\omega t).$$

時間を含む摂動論を用いて，運動量 $\boldsymbol{p}$ を持つ電子が放出される遷移率の表式を求めよ．特に，放出電子の角度分布を（z-軸に対して定義される θ と ϕ を用いて）どのように計算したらよいかを示せ．この問題と（もっと現実的な）光電子効果との類似点と相違点を，簡潔に述べよ．（ノート：初期状態の波動関数に関しては，問題34を見よ．規格化上の困難があれば終状態の波動関数を

$$\psi_f(\boldsymbol{x})=\frac{1}{L^{3/2}}e^{i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}/\hbar}$$

のようにとってよい．L は非常に大きいとするが，観測できる効果は L に依らないことを示せなければならない．）

36. 2次元空間の自由粒子の状態密度を表わす式を導け．すなわち

$$\rho(E)\,dEd\Omega=\left(\frac{L}{2\pi}\right)^3\left(\frac{mk}{\hbar^2}\right)dEd\Omega,$$

$$\left(\boldsymbol{k}\equiv\frac{\boldsymbol{p}}{\hbar},\ \ \boldsymbol{E}=\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}\right)$$

の2次元の類似式であるが，答を k（または E）の関数に $dEd\phi$ をかけた形に書くこと．この ϕ は固定軸との間の角度で，2次元内の運動量の方向を記述する．

37. 1次元空間内を運動するように制限された質量 m の粒子が，無限に高い壁のポテンシャル

$$V>\infty \qquad x<0,\ x>L \text{ に対して},$$
$$V=0 \qquad 0\leq x\leq L \text{ に対して}$$

によって $0<x<L$ 内に閉じ込められている．高いエネルギーに対して状態密度（すなわち，単位エネルギー間隔あたりの状態数）の表式を，E の関数として求めよ．（得られた答の次元を確かめよ．）

38. 角振動数 ω の直線偏光が，角振動数 ω_0 の3次元等方的調和振動子の基底状態で波動関数が近似できる一電子“原子”に当たる．光電子放出の微分断面積は，運動量 $\hbar k_f$ の放出電子が平面波状態にあると見なせるとき

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}=\frac{4\alpha\hbar^2k_f^3}{m^2\omega\omega_0}\sqrt{\frac{\pi\hbar}{m\omega_0}}\exp\left\{-\frac{\hbar}{m\omega_0}\left[k_f^2+\left(\frac{\omega}{c}\right)^2\right]\right\}$$
$$\times\sin^2\theta\cos^2\phi\exp\left[\left(\frac{2\hbar k_f\omega}{m\omega_0 c}\right)\cos\theta\right]$$

で与えられることを示せ．（ここに使われている座標系は，図5.10に示されたものである．）

39. 基底状態にある水素原子が，ある決まった運動量 $\boldsymbol{p}'$ を持つ確率 $|\phi(\boldsymbol{p}')|^2d^3p'$ を求めよ．（これは3次元フーリエ変換の，とてもよい練習問題である．角度積分を実行するためには，z-軸を $\boldsymbol{p}$ の方向に選べ．）

40. 水素原子に対して，$\tau(2p\rightarrow 1s)$ の表式を求めよ．これが 1.6×10^{-9}s に等しいことを確かめよ．

第６章

同一種類の粒子

この短い章では，もっぱら粒子の同一性に由来する顕著な量子力学的効果をいくつか議論する．また水素や水素様原子よりも複雑な原子への応用も考察する．

6.1　置換対称性

古典物理学ではたとえ粒子がよく似ていても，個々の粒子の運動を追跡することが可能である．粒子１と粒子２をあわせて一つの系と考えるとき，原理的には粒子１の軌跡と粒子２の軌跡を別々に，時々刻々追っていくことができる．記録をつけるためには，その中の一つを青く他を赤く塗り，時間の経過とともに赤い粒子がどのように運動し，また青い粒子がどのように運動するか調べればよい．

しかし量子力学では，同一種類の粒子は全く見分けがつかない．各々の粒子の特徴を，すべての交換する観測量の組以上のものを用いて記すことはできない．もちろん粒子に青く色を塗って区別することはできない．軌跡を追うこともできない．それには時々刻々の位置の測定が伴い，必然的に系を乱してしまう．特に図 6.1に示した(a)，(b)の二つの場合は，原理的にも区別がつかない．

簡単のために２個の粒子だけを考えよう．一方の粒子で粒子１と呼ぶものが，$|k'\rangle$ で特徴づけられているとしよう．この k' は，観測量の完全な組をひとまとめにした指標である．同じように他の粒子のケットを，$|k''\rangle$ とする．この２粒子の状態ケットは積の形に

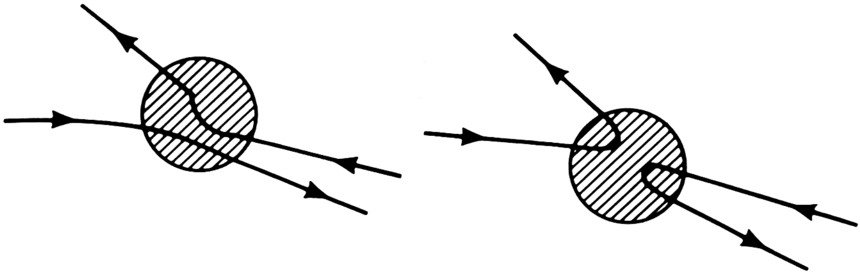


図 6.1.　2電子系の二つの異なる経路，(a)，(b)．この例では，電子がどちらの経路をたどったかを，原理的にも述べることができない．

$$|k'\rangle|k''\rangle \tag{6.1.1}$$

と書くことができる．ここで最初のケットは粒子1を，2番目のケットは粒子2をさすと了解する．また

$$|k''\rangle|k'\rangle \tag{6.1.2}$$

を考えることもできる．ここでは粒子1は $|k''\rangle$ により，粒子2は $|k'\rangle$ により表わされている．二つの粒子は区別できないが，$k' \neq k''$ に対しては(6.1.1)と(6.1.2)は数学的に異なるケットであることに注意しよう．事実，$k' \neq k''$ であれば，これらは互いに直交している．

この2粒子系に対して測定をしたとする．一つの粒子に対して k' が，他の粒子に対して k'' が得られるであろう．しかしそれによって状態ケットが $|k'\rangle|k''\rangle$ なのか $|k''\rangle|k'\rangle$ なのか，さらに二つの線形結合なのかを判断することはできない．いいかえれば

$$c_1|k'\rangle|k''\rangle + c_2|k''\rangle|k'\rangle \tag{6.1.3}$$

の形のすべてのケットは，測定を実施したとき全く同じ固有値の組を与える．これが**交換縮退**と呼ばれるものである．交換縮退があるとやっかいなことに，１粒子の場合と違って観測量の完全な組の固有値を指定しても，状態ケットを完全に決定することができない．この困難を自然が切り抜けている仕方は，全く巧妙なものである．だが先に進む前に，交換対称を扱う数学を展開しておこう．

まず置換演算子 P_{12} を

$$P_{12}|k'\rangle|k''\rangle = |k''\rangle|k'\rangle \tag{6.1.4}$$

により定義する．明らかに

$$P_{21} = P_{12} \quad \text{および} \quad P_{12}^2 = 1 \tag{6.1.5}$$

が成り立つ．P_{12} がかかると指標として k' がついていた粒子１は，k'' がつく粒子１になる．また k'' がついていた粒子２は，k' がつく粒子２に変わる，いいかえればこの演算子には，粒子１と２の入れかえをする効果がある．

実際に粒子の番号がついた観測量に，よく出会うことがある．たとえば２電子系で $\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2$ の中の $\mathbf{S}_1$ ($\mathbf{S}_2$)は，粒子１(２)のスピン演算子を表わす．簡単のために２粒子状態のケットが，それぞれの粒子の一つの観測量 A の固有値で完全に指定される場合を考えよう：

$$A_1|a'\rangle|a''\rangle = a'|a'\rangle|a''\rangle \tag{6.1.6a}$$

および

$$A_2|a'\rangle|a''\rangle = a''|a'\rangle|a''\rangle \tag{6.1.6b}$$

において A につけられた添字は粒子の番号を表わし，A_1，A_2 はそれぞれ粒子１，２に対する観測量 A である．P_{12} を(6.1.6a)の両辺に作用させると

$$P_{12}A_1P_{12}^{-1}P_{12}|a'\rangle|a''\rangle = a'P_{12}|a'\rangle|a''\rangle$$

$$= P_{12} A_1 P_{12}^{-1} |a''\rangle |a'\rangle = a' |a''\rangle |a'\rangle \tag{6.1.7}$$

が得られる．この式が(6.1.6b)と矛盾しないためには

$$P_{12} A_1 P_{12}^{-1} = A_2 \tag{6.1.8}$$

が必要である．これより P_{12} が観測量につけた粒子の番号を変えていることが分かる．

ここで二つの同一種類の粒子からなる系のハミルトニアンを考えよう．運動量や位置演算子といった観測量は，ハミルトニアンの中に必然的に対称的に現われていなければならない．たとえば

$$H = \frac{\boldsymbol{p}_1^2}{2m} + \frac{\boldsymbol{p}_2^2}{2m} + V_{\text{pair}}(|\boldsymbol{x}_1 - \boldsymbol{x}_2|) + V_{\text{ext}}(\boldsymbol{x}_1) + V_{\text{ext}}(\boldsymbol{x}_2) \tag{6.1.9}$$

のように表わされる．この式で2粒子間の相互作用は，粒子と他の外場ポテンシャルとの相互作用から分離されている．2個の同種粒子の観測量から作られた H に対して，明らかに

$$P_{12} H P_{12}^{-1} = H \tag{6.1.10}$$

が成り立つ．P_{12} は H と交換するので，P_{12} は運動の定数といえる．P_{12} の固有値として許される値は，(6.1.5)により $+1$ と -1 である．したがって，初めに2粒子状態ケットが対称的（反対称的）であったとすると，その後ずっと同じ対称性が保たれる．

P_{12} の固有ケットとして2種の特別な線形結合を選ぼう：

$$|k'k''\rangle_+ \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}(|k'\rangle|k''\rangle + |k''\rangle|k'\rangle) \tag{6.1.11a}$$

および

$$|k'k''\rangle_- \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}(|k'\rangle|k''\rangle - |k''\rangle|k'\rangle) \tag{6.1.11b}$$

である．ここで対称化演算子と反対称化演算子を，それぞれ次のように定義できる：

$$S_{12} \equiv \frac{1}{2}(1 + P_{12}),\quad A_{12} \equiv \frac{1}{2}(1 - P_{12}). \qquad (6.1.12)$$

$S_{12}(A_{12})$を $|k'\rangle|k''\rangle$ と $|k''\rangle|k'\rangle$ の任意の線形結合にかけると，得られるケットは必然的に対称的（反対称的）である．これは次のように簡単に分かる：

$$\left\{\begin{matrix} S_{12} \\ A_{12} \end{matrix}\right\}[c_1|k'\rangle|k''\rangle + c_2|k''\rangle|k'\rangle]$$

$$= \frac{1}{2}(c_1|k'\rangle|k''\rangle + c_2|k''\rangle|k'\rangle) \pm \frac{1}{2}(c_1|k''\rangle|k'\rangle + c_2|k'\rangle|k''\rangle)$$

$$= \frac{c_1 \pm c_2}{2}(|k'\rangle|k''\rangle \pm |k''\rangle|k'\rangle). \qquad (6.1.13)$$

以上の考察は，同種の多粒子からなる系に拡張できる．P_{ij} を

$$P_{ij}|k'\rangle|k''\rangle \cdots |k^i\rangle|k^{i+1}\rangle \cdots |k^j\rangle \cdots$$
$$= |k'\rangle|k''\rangle \cdots |k^j\rangle|k^{i+1}\rangle \cdots |k^i\rangle \cdots \qquad (6.1.14)$$

により定義する．明らかに以前と同様に

$$P_{ij}^2 = 1 \qquad (6.1.15)$$

であり，P_{ij} が取ることのできる固有値は $+1$ と -1 である．しかし一般に

$$[P_{ij}, P_{kl}] \neq 0 \qquad (6.1.16)$$

となることに注意するのは重要である．

具体的に同種の3粒子系を調べることは有益である．まず

$$|k'>|k''>|k'''> \tag{6.1.17}$$

の形をした可能なケットは，k'，k''，k''' がすべて異なるとして $3!=6$ 個ある．すなわち6重の交換縮退がある．しかし状態が完全対称か完全反対称かでなければならないとすると，それぞれただ一つの線形結合だけが作られる．実際に

$$\begin{aligned}|k'k''k'''>_{\pm} \equiv \frac{1}{\sqrt{6}}\{&|k'>|k''>|k'''> \pm |k''>|k'>|k'''>\\ &+|k''>|k'''>|k'> \pm |k'''>|k''>|k'>\\ &+|k'''>|k'>|k''> \pm |k'>|k'''>|k''>\}\end{aligned} \tag{6.1.18}$$

が作れる．これらは共に P_{12}，P_{23} および P_{13} の同時固有ケットである．ところで先に注意したように全部では6個の独立した状態ケットがある．したがって完全対称でも完全反対称でもない，4個の独立な状態ケットがあることになる．さらに演算子 P_{123} を

$$P_{123}(|k'>|k''>|k'''>) = |k''>|k'''>|k'> \tag{6.1.19}$$

により定義して導入することもできる．一方

$$P_{12}P_{13}(|k'>|k''>|k'''>) = P_{12}(|k'''>|k''>|k'>) = |k''>|k'''>|k'> \tag{6.1.20}$$

であるから，$P_{123}=P_{12}P_{13}$ と表わせることに注意しよう．

(6.1.18)式を書く際に，k'，k''，k''' がすべて異なることを仮定した．もし3個の指標のうち2個が一致していたら，完全反対称状態を作ることは不可能である．完全対称状態は

$$\begin{aligned}|k'k'k''>_{+} = \frac{1}{\sqrt{3}}(&|k'>|k'>|k''> + |k'>|k''>|k'>\\ &+|k''>|k'>|k'>)\end{aligned} \tag{6.1.21}$$

で与えられる．この規格化因子は $\sqrt{2!/3!}$ である．さらに一般的な場合で，全粒子数が N，$|k^{(i)}>$ が現われる回数が N_i のときの規格化因子は

$$\sqrt{\frac{N_1!\ N_2!\ \cdots\ N_n!}{N!}} \tag{6.1.22}$$

である．

6.2 対称化の要請

自然界が利用している状態が，完全対称の状態か完全反対称の状態かについて，今までは議論していない．N 個の同一種類の粒子を含む系は，任意の 2 粒子の入れ換えに関して，完全対称であるか完全反対称であるかが分かっている．完全対称である場合，粒子は**ボース-アインシュタイン（B-E）統計**を満足するといわれ，**ボソン**と呼ばれる．完全反対称である場合，粒子は**フェルミ-ディラック（F-D）統計**を満足するといわれ，**フェルミオン**と呼ばれる．すなわち i 番目の粒子と j 番目の粒子を入れ換える置換演算子を P_{ij} として

$$P_{ij}|N\text{ 個の同一ボソン}> = +\,|N\text{ 個の同一ボソン}> \tag{6.2.1a}$$

$$P_{ij}|N\text{ 個の同一フェルミオン}> = -\,|N\text{ 個の同一フェルミオン}> \tag{6.2.1b}$$

が成り立つ．ここで i，j は任意である．これらを混合した対称性が存在しないのは，経験的事実である．

さらに注目すべきは粒子のスピンと粒子の従う統計に関連があることである：

半整数スピンの粒子はフェルミオンである． (6.2.2a)

整数スピンの粒子はボソンである． (6.2.2b)

ここで粒子は複合粒子であってよい．たとえば ^{3}He の核は，電子 e^- や陽子と同様にフェルミオンである．^{4}He の核は中間子 $\pi^\pm$，π^0 と同様にボソンである．

スピンと統計性との関連は我々の知る限り，例外なく厳密に成り立つ自然界の規則である．非相対論的量子力学の枠組の中では，この原理は経験的要請として受け入れなければならない．しかし相対論的量子論では，半整数スピンの粒子はボソンであり得ないこと，また整数スピン粒子はフェルミオンであり得ないことが証明できる．

電子がフェルミオンであることの直接の結果として，電子は**パウリの排他原理**を満足しなければならない．この原理は二つの電子が同じ状態を占めることができないことを述べている．なぜならば $|k'\rangle|k'\rangle$ といった状態は必然的に対称的であり，フェルミオンにとってはこのような状態がとれないのである．よく知られているように，パウリの排他原理は原子物理，分子物理をはじめ化学全体の礎石である．

フェルミオンとボソンの劇的な違いを説明するために2粒子を考え，その各々は k' と k'' で表わされるただ二つの状態を占めることができるとしよう．2個のフェルミオンの系では選択の余地がない．可能なのはただ一つ

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|k'\rangle|k''\rangle - |k''\rangle|k'\rangle) \tag{6.2.3}$$

である．ボソン系では3個の可能な状態がある：

$$|k'\rangle|k'\rangle,\quad |k''\rangle|k''\rangle,\quad \frac{1}{\sqrt{2}}(|k'\rangle|k''\rangle + |k''\rangle|k'\rangle). \tag{6.2.4}$$

これに対し対称性に関する制限がない**マックスウェル-ボルツマン（M-B）統計**を満足する“古典的”粒子では，全部で4個の独立な状態がある：

$$|k'\rangle|k''\rangle,\quad |k''\rangle|k'\rangle,\quad |k'\rangle|k'\rangle,\quad |k''\rangle|k''\rangle. \tag{6.2.5}$$

これから分かるように，フェルミオンの場合には2個の粒子がともに

同じ状態を占めることができない．ボソンの場合，とることのできる三つのケットの中二つでは2粒子が同じ状態を占めている．古典（M-B）統計の場合，とることのできる四つのケットの中二つでは，2粒子が同じ状態を占めている．この意味でフェルミオンが最も社交的でない．同じ状態に来ないように，互いに避け合っている．一方，ボソンは最も社交的で同じ状態に居ることが好きである．M-B統計に従う古典粒子よりも，そうである．

フェルミオンとボソンの差は，低温で最も劇的に表われる．液体ヘリウム4（^{4}He）のようなボソンからなる系では，極低温ですべての粒子が同じ基底状態に落ち込む傾向を示す．これは**ボース-アインシュタイン凝縮**と呼ばれ，フェルミオンから成る系があずかることのできない特徴である．

6.3　2電子系

いま特に2電子系を考えよう．置換演算子の固有値は必然的に-1である．用いる基底ケットは$\boldsymbol{x}_1$，$\boldsymbol{x}_2$，m_{s1}，m_{s2}で指定されるとする．ここでm_{s1}，m_{s2}はそれぞれ電子1，2のスピン磁気量子数を表わす．

2電子系の波動関数を，$\boldsymbol{x}_1$，$\boldsymbol{x}_2$，m_{s1}，m_{s2}の固有ブラと内積をとった状態ケットの線形結合として，次のように表現することができる：

$$\psi = \sum_{m_{S1}} \sum_{m_{S2}} C(m_{s1}, m_{s2}) \langle \boldsymbol{x}_1, m_{s1}; \boldsymbol{x}_2, m_{s2} | \alpha \rangle . \tag{6.3.1}$$

ハミルトニアンが$\boldsymbol{S}^2_{\rm tot}$と交換すると

$$[\boldsymbol{S}^2_{\rm tot}, H] = 0 \tag{6.3.2}$$

であり，エネルギー固有関数は$\boldsymbol{S}^2_{\rm tot}$の固有関数であることが期待される．そこで$\psi$を

$$\psi = \phi(\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2)\chi \tag{6.3.3}$$

と表わすと，スピン関数χは次の中の一つであると予想される：

$$\chi(m_{s1}, m_{s2}) = \begin{cases} \chi_{++} & \\ \dfrac{1}{\sqrt{2}}(\chi_{+-} + \chi_{-+}) & \text{三重項（対称的）} \\ \chi_{--} & \\ \dfrac{1}{\sqrt{2}}(\chi_{+-} - \chi_{-+}) & \text{一重項（反対称的）} \end{cases} \tag{6.3.4}$$

ここで χ_{+-} は $\chi\left(m_{s1} = \frac{1}{2}, m_{s2} = -\frac{1}{2}\right)$ に相当する．三重項スピン関数はすべて対称的であることに注目しよう．これははしご演算子 $S_{1-} + S_{2-}$ が P_{12} と交換し，$|+\rangle|+\rangle$ 状態が P_{12} の下で偶であることから納得できる．

つぎに

$$\langle \boldsymbol{x}_1, m_{s1} ; \boldsymbol{x}_2, m_{s2} | P_{12} | \alpha \rangle = \langle \boldsymbol{x}_2, m_{s2} ; \boldsymbol{x}_1, m_{s1} | \alpha \rangle \tag{6.3.5}$$

に注意すると，フェルミ-ディラック統計は

$$\langle \boldsymbol{x}_1, m_{s1} ; \boldsymbol{x}_2, m_{s2} | \alpha \rangle = - \langle \boldsymbol{x}_2, m_{s2} ; \boldsymbol{x}_1, m_{s1} | \alpha \rangle \tag{6.3.6}$$

を要請していることが分かる．明らかに P_{12} は

$$P_{12} = P_{12}^{(\text{空間})} P_{12}^{(\text{スピン})} \tag{6.3.7}$$

と書くことができる．ここで $P_{12}^{(\text{空間})}$ は空間座標のみの交換であり，$P_{12}^{(\text{スピン})}$ はスピン状態のみの交換である．おもしろいことに $P_{12}^{(\text{スピン})}$ は

$$P_{12}^{(\text{スピン})} = \frac{1}{2}\left(1 + \frac{4}{\hbar^2} \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2\right) \tag{6.3.8}$$

と表わすことができる．これは

$$\boldsymbol{S}_1\cdot\boldsymbol{S}_2=\begin{cases}\dfrac{\hbar^2}{4} & (\text{三重項})\\ -\dfrac{3\hbar^2}{4} & (\text{一重項})\end{cases} \tag{6.3.9}$$

から導ける．

(6.3.3)から

$$|\alpha> \to P_{12}|\alpha> \tag{6.3.10}$$

とすることは

$$\phi(\boldsymbol{x}_1,\ \boldsymbol{x}_2)\to\phi(\boldsymbol{x}_2,\ \boldsymbol{x}_1),\quad \chi(m_{S1},\ m_{S2})\to\chi(m_{S2},\ m_{S1}) \tag{6.3.11}$$

に等しいことが分かる．これは(6.3.6)と共に用いると，波動関数の空間部分が対称的（反対称的）であると，スピン部分が反対称的（対称的）でなければならないことを意味している．つまりスピン三重項状態は反対称的空間関数と組にしなければならない．またスピン一重項状態は対称的空間関数と組にしなければならない．

波動関数の空間部分 $\phi(\boldsymbol{x}_1,\ \boldsymbol{x}_2)$ には，通常の確率的解釈ができる．電子 1 を $\boldsymbol{x}_1$ のまわりの体積要素 d^3x_1 中に，電子 2 を $\boldsymbol{x}_2$ のまわりの体積要素 d^3x_2 の中に見出す確率は

$$|\phi(\boldsymbol{x}_1,\ \boldsymbol{x}_2)|^2 d^3x_1 d^3x_2 \tag{6.3.12}$$

である．この意味をもう少し詳しく調べるために，特別な場合として 2 電子間の相互作用［たとえば $V_{\mathrm{pair}}(|\boldsymbol{x}_1-\boldsymbol{x}_2|)$, $\boldsymbol{S}_1\cdot\boldsymbol{S}_2$］が無視できる場合を考えよう．スピン依存性がないならエネルギー固有関数 ψ に対する波動方程式［(6.1.9)を見よ］

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla_1{}^2-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_2{}^2+V_{\mathrm{ext}}(\boldsymbol{x}_1)+V_{\mathrm{ext}}(\boldsymbol{x}_2)\right]\psi=E\psi \tag{6.3.13}$$

は，分離可能である．解として $\omega_A(\boldsymbol{x}_1)\,\omega_B(\boldsymbol{x}_2)$ にスピン関数をかけた形のものがある．スピン依存性がないので，$\boldsymbol{S}^2{}_{\text{tot}}$ は必然的に（また明らかに）H と交換し，スピン部分は $P_{12}{}^{(\text{スピン})}$ の下で決まった対称性を持つ三重項ないし一重項でなければならない．すると空間部分は $\omega_A(\boldsymbol{x}_1)\,\omega_B(\boldsymbol{x}_2)$ と $\omega_A(\boldsymbol{x}_2)\,\omega_B(\boldsymbol{x}_1)$ の対称的ないし反対称的結合によって表わされなければならない：

$$\phi(\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\omega_A(\boldsymbol{x}_1)\omega_B(\boldsymbol{x}_2) \pm \omega_A(\boldsymbol{x}_2)\omega_B(\boldsymbol{x}_1)\right]. \tag{6.3.14}$$

ここで上の符号はスピン一重項に対して，下のはスピン三重項に対して用いる．電子1を $\boldsymbol{x}_1$ のまわりの d^3x_1 に，電子2を $\boldsymbol{x}_2$ のまわりの d^3x_2 に観測する確率は

$$\frac{1}{2}\Big\{\,|\omega_A(\boldsymbol{x}_1)|^2|\omega_B(\boldsymbol{x}_2)|^2 + |\omega_A(\boldsymbol{x}_2)|^2|\omega_B(\boldsymbol{x}_1)|^2$$

$$\pm 2\,\mathrm{Re}\left[\omega_A(\boldsymbol{x}_1)\omega_B(\boldsymbol{x}_2)\omega_A^*(\boldsymbol{x}_2)\omega_B^*(\boldsymbol{x}_1)\right]\Big\}\, d^3x_1 d^3x_2 \tag{6.3.15}$$

で与えられる．波形かっこの中の最後の項は**交換密度**と呼ばれている．

すぐ分かるように，2電子がスピン三重項状態にあるときは2番目の電子を空間内の同じ点に見出す確率はゼロである．いいかえれば電子はスピンが三重項状態にあると，互いに避け合う．これと対照的に電子のスピンが一重項状態では，交換密度の存在のために，2電子を空間内の同じ点に見出す確率が増大する．

同一性の問題が重要になるのは明らかに，交換密度が無視できない，すなわち関数 ω_A と ω_B の間の重なりが相当大きいときである．この特徴をはっきりと見るために極端な場合として，$|\omega_A(\boldsymbol{x})|^2$（この $\boldsymbol{x}$ が表わすのは $\boldsymbol{x}_1$ でも $\boldsymbol{x}_2$ でもよい）が領域Aでのみ大きく，$|\omega_B(\boldsymbol{x})|^2$ は領域Bでのみ大きい場合を考えよう．この二つの領域は遠く離れているとする．いま d^3x_1 を領域A内に，また d^3x_2 を領域B内に選ぶ．図6.2を見よ．このとき重要な項は(6.3.15)中の第1項

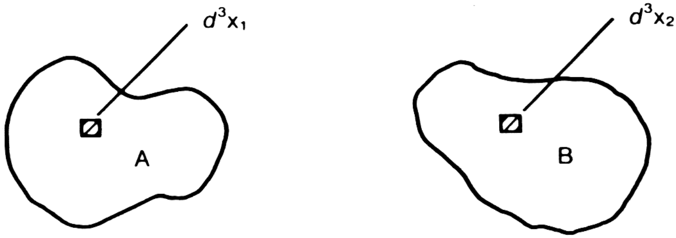


図 6.2. 遠く隔たった二つの領域，A，B．$|\omega_A(\boldsymbol{x})|^2$ は領域 A で大きく，$|\omega_B(\boldsymbol{x})|^2$ は領域 B で大きい．

$$|\omega_A(\boldsymbol{x}_1)|^2|\omega_B(\boldsymbol{x}_2)|^2 \tag{6.3.16}$$

のみであり，これは古典的粒子に対して期待される複合確率密度に他ならない．これに関連して，古典粒子ならば必ずよく局在していて同一性の問題など起こらないことを思い出さそう．このように交換密度の項は，領域 A と B が重ならないとき重要でない．電子が互いに遠く離れ重なりが無視できるならば，反対称化する必要はない．これは全く喜ばしいことである．我々は決して100億個の電子の反対称化の問題に悩む必要はない†．またロサンゼルスにある 1 電子と北京にある 1 電子の間の反対称化の要請を考慮する必要もない．

6.4 ヘリウム原子

ヘリウム原子を勉強することは，様々な理由で大変有益である．第一にこれは，6.3節で出会った同一性の問題が重要な役割をする最も簡単な現実の問題である．第二にこれは単純な系でありながら，その 2 粒子シュレーディンガー方程式を解析的に解くことができない．そこでこれは摂動論や変分法の効用を説明する絶好の機会となる．

系のハミルトニアンは $r_1 \equiv |\boldsymbol{x}_1|$，$r_2 \equiv |\boldsymbol{x}_2|$，$r_{12} \equiv |\boldsymbol{x}_1 - \boldsymbol{x}_2|$ として

† 訳注：高密度，低温では反対称性が本質的である．

$$H = \frac{\boldsymbol{p}_1^2}{2m} + \frac{\boldsymbol{p}_2^2}{2m} - \frac{2e^2}{r_1} - \frac{2e^2}{r_2} + \frac{e^2}{r_{12}} \tag{6.4.1}$$

で与えられる．図6.3を見よ．

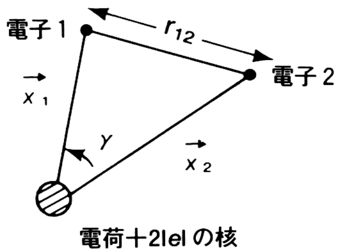


図 6.3. ヘリウム原子の概念図.

まず e^2/r_{12} がなかったとしよう．すると同一性の問題を無視すれば，波動関数はちょうど二つの水素原子の波動関数の積で，$Z = 1$ を $Z = 2$ に変えたものとなろう．全スピンは運動の定数だから，スピン状態は一重項か三重項である．電子の一つが基底状態で他の一つが (nlm) で表わされる励起状態にあるという重要な例では，波動関数の空間部分は

$$\phi(\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\,\psi_{100}(\boldsymbol{x}_1)\psi_{nlm}(\boldsymbol{x}_2) \pm \psi_{100}(\boldsymbol{x}_2)\,\psi_{nlm}(\boldsymbol{x}_1)] \tag{6.4.2}$$

と書ける．ここで上（下）の符号はスピン一重項（三重項）に対するものである．この1励起状態の一般形については，またあとで述べる．

基底状態に関しては特別の扱いが必要である．この電子配置は $(1s)^2$ で表わされ，2電子とも $n = 1$，$l = 0$ にある．空間部分の関数は必然的に対称的であり，スピン一重項関数のみが許される．したがって $Z = 2$ として

$$\psi_{100}(\boldsymbol{x}_1)\psi_{100}(\boldsymbol{x}_2)\chi_{一重項} = \frac{Z^3}{\pi {a_0}^3} e^{-Z(r_1+r_2)/a_0}\chi_{一重項} \tag{6.4.3}$$

が得られる．この“摂動を受けていない”波動関数が基底状態のエネルギーとして

$$E = 2\times 4\left(-\frac{e^2}{2a_0}\right) \tag{6.4.4}$$

を与えるのは，当然のことである．これは実験値より30％大きな値である．

以上はまだ計算の出発点である．上式(6.4.3)を求める際に，２電子間の相互作用を記述する(6.4.1)の最後の項を，完全に無視していたからである．もっとよいエネルギー値を得るための手段の一つは，非摂動波動関数として(6.4.3)をとり摂動として e^2/r_{12} を用い，１次の摂動論を適用することである．すると

$$\Delta_{(1s)^2} = \left\langle \frac{e^2}{r_{12}} \right\rangle_{(1s)^2} = \iint \frac{Z^6}{\pi^2 {a_0}^6} e^{-2Z(r_1+r_2)/a_0} \frac{e^2}{r_{12}} d^3x_1 d^3x_2 \tag{6.4.5}$$

が得られる．ここに示された積分を実行する際に，まず

$$\frac{1}{r_{12}} = \frac{1}{\sqrt{{r_1}^2 + {r_2}^2 - 2r_1r_2\cos\gamma}} = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{r_<^l}{r_>^{l+1}} P_l(\cos\gamma) \tag{6.4.6}$$

に注意する．上式で $r_>$ ($r_<$) は r_1 と r_2 のうちの大きい（小さい）方であり γ は $\boldsymbol{x}_1$ と $\boldsymbol{x}_2$ の間の角度である．角度積分は球面調和関数の加法定理

$$P_l(\cos\gamma) = \frac{4\pi}{2l+1} \sum_{m=-l}^{l} Y_l^{m*}(\theta_1, \phi_1) Y_l^m(\theta_2, \phi_2) \tag{6.4.7}$$

を用い $P_l(\cos\gamma)$ を $Y_l^m(\theta_1, \phi_1)$ と $Y_l^m(\theta_2, \phi_2)$ により表わすと容易に実行できる：

$$\int Y_l^m(\theta_i, \phi_i)\, d\Omega_i = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}(4\pi)\,\delta_{l0}\delta_{m0}\,. \tag{6.4.8}$$

動径積分は初等的である（しかし長い代数計算がいる）．その結果

$$\int_0^\infty\left[\int_0^{r_1}\frac{1}{r_1}e^{-(2Z/a_0)(r_1+r_2)}r_2{}^2dr_2+\int_{r_1}^\infty\frac{1}{r_2}e^{-(2Z/a_0)(r_1+r_2)}r_2{}^2dr_2\right]r_1{}^2dr_1$$
$$=\frac{5}{128}\frac{a_0{}^5}{Z^5} \tag{6.4.9}$$

となる．これらをまとめると（$Z=2$に対して）

$$\Delta_{(1S)^2}=\left(\frac{Z^6e^2}{\pi^2a_0{}^6}\right)4\pi(\sqrt{4\pi})^2\left(\frac{5}{128}\right)\left(\frac{a_0{}^5}{Z^5}\right)$$
$$=\left(\frac{5}{2}\right)\left(\frac{e^2}{2a_0}\right) \tag{6.4.10}$$

である．このエネルギーのずれを(6.4.4)に加えると

$$E_{\mathrm{cal}}=\left(-8+\frac{5}{2}\right)\left(\frac{e^2}{2a_0}\right)\simeq-74.8\,\mathrm{eV} \tag{6.4.11}$$

が得られる．これを実験値

$$E_{\mathrm{exp}}=-78.8\,\mathrm{eV} \tag{6.4.12}$$

と比較してみよ．

これはかけ離れた値でない．しかしもっとよい計算もできる！　変分法を用い，変分パラメータとして Z をとろう．これを Z_{eff} と呼ぶ．このように選ぶ物理的理由は，一方の電子が感じる有効な Z が2より小さくなっていることによる．すなわち原点にある2単位の正電荷（図6.3を見よ）が，他方の電子の負の帯電した雲により“遮敝されて”いるのである．いいかえればもう一方の電子は，中心にあるヘリウム核の正電荷を中和する傾向を持つ．規格化された試行関数として

$$\langle \boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2|\tilde{0}\rangle=\left(\frac{Z_{\mathrm{eff}}^3}{\pi a_0{}^3}\right)\mathrm{e}^{-Z_{\mathrm{eff}}(r_1+r_2)/a_0} \tag{6.4.13}$$

を用いると

$$\overline{H}=\left\langle\tilde{0}\right|\frac{\boldsymbol{p}_1{}^2}{2m}+\frac{\boldsymbol{p}_2{}^2}{2m}\left|\tilde{0}\right\rangle-\left\langle\tilde{0}\right|\frac{Ze^2}{r_1}+\frac{Ze^2}{r_2}\left|\tilde{0}\right\rangle+\left\langle\tilde{0}\right|\frac{e^2}{r_{12}}\left|\tilde{0}\right\rangle$$

$$=\left(2\frac{Z^2{}_{\mathrm{eff}}}{2}-2ZZ_{\mathrm{eff}}+\frac{5}{8}Z_{\mathrm{eff}}\right)\left(\frac{e^2}{a_0}\right) \tag{6.4.14}$$

が得られる．$\overline{H}$ が最小になるのは

$$Z_{\mathrm{eff}}=2-\frac{5}{16}=1.6875 \tag{6.4.15}$$

であることはすぐに分かる．予期したようにこれは 2 より小さい．Z_{eff} にこの値を用いると

$$E_{\mathrm{cal}}=-77.5\,\mathrm{eV} \tag{6.4.16}$$

が得られる．試行関数のあらさを考えると，この値は実験値と十分に近い．

歴史上，この成功はシュレーディンガーの波動力学が正しい道筋にあることを示す最初の徴候の一つと考えられた．このような数を純粋に代数的（演算子）法で得ることはできない．このヘリウムの計算は1927年に A. ウンゼルトによって初めてなされた．*

続いて励起状態を手短かに考察しよう．同一性に由来する量子力学的効果を説明する観点からすると，この問題はさらに興味深い．単に $(1s)(nl)$ を考えよう．この状態のエネルギーを

$$E=E_{100}+E_{nlm}+\Delta E \tag{6.4.17}$$

のように書く．1 次の摂動論では，ΔE は e^2/r_{12} の期待値を計算することにより求められる．これを

$$\left\langle\frac{e^2}{r_{12}}\right\rangle=I\pm J \tag{6.4.18}$$

* A. Unsöld, Ann. Phys. **82** (1927) 355.

と表わすことができる．I と J はそれぞれ直接積分，交換積分と呼ばれ

$$I=\int d^3x_1\int d^3x_2\,|\psi_{100}(\boldsymbol{x}_1)|^2\,|\psi_{nlm}(\boldsymbol{x}_2)|^2\frac{e^2}{r_{12}}, \tag{6.4.19a}$$

$$J=\int d^3x_1\int d^3x_2\,\psi_{100}(\boldsymbol{x}_1)\psi_{nlm}(\boldsymbol{x}_2)\frac{e^2}{r_{12}}\psi^*_{100}(\boldsymbol{x}_2)\psi^*_{nlm}(\boldsymbol{x}_1) \tag{6.4.19b}$$

により与えられる．上（下）の符号はスピン一重項（三重項）に対するものである．明らかに I は正である．また J も正であることが示せる．そこで最終的結果はこの電子配置に対してスピン一重項状態が図6.4に示されているように高いエネルギーをとる．

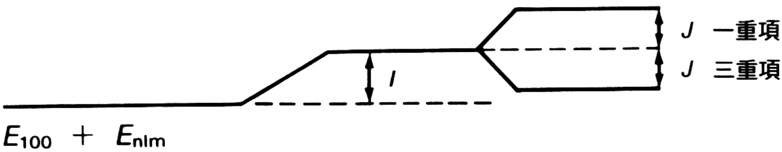


図 6.4. ヘリウム原子の($1s$)(nl)配置のエネルギー準位分裂を示す概念図．

この物理的解釈は次のようである．一重項の場合，空間部分の関数は対称的であり，電子は互いに近寄る傾向がある．そこで静電的反発力の効果をまともに受け，エネルギーが高くなる．三重項の場合，空間部分の関数は反対称的であり，電子は互いに避け合う傾向を持つ．スピン一重項状態のヘリウムは**パラヘリウム**と呼ばれ，スピン三重項状態のヘリウムは**オルソヘリウム**と呼ばれている．それぞれの電子配置でパラ状態とオルソ状態への分裂が起り，パラ状態はエネルギーが高い状態になる．一方，基底状態ではパラヘリウムだけが可能である．ヘリウム原子のエネルギー準位の概念図として，図6.5を参照せよ．

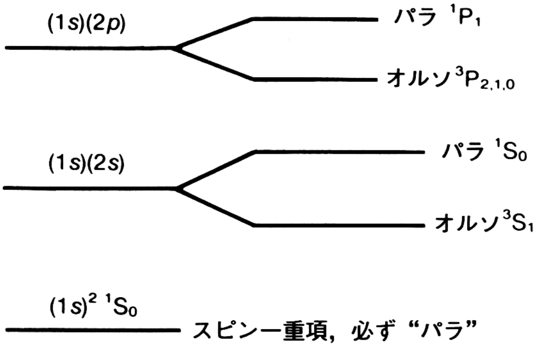


図 6.5. ヘリウム原子の低エネルギー電子配置におけるエネルギー準位を示す概念図.

もとのハミルトニアンにはスピン依存性がないことを思い出すのは重要である．ポテンシャルが単に三つのクーロン項から構成されているので $\boldsymbol{S}_1 \cdot \boldsymbol{S}_2$ といったような項はなかった．しかしスピンに依存する効果は存在し，スピンが平行な電子は低いエネルギーを持つ．これはフェルミ-ディラック統計に由来する.

ヘリウム原子のエネルギー準位が見かけ上スピンに依存していることの説明は，ハイゼンベルクによるものである．電子スピンが巨視的距離にわたってそろっている強磁性の物理的起源もまた，本質的に同じであると信じられている．しかし強磁性の性質を第一原理から定量的に計算するのは，非常に困難である.

6.5　置換対称性とヤングの図式

置換対称性によって課せられる要請を記述する際，**ヤングの図式**と呼ばれる非常に便利な記載法がある．これは1901年にこの問題に関する基礎的論文を出版した，イギリスの牧師 A. ヤングにちなんで名づけられている．この節はこの方法を実際に使ってみようとする読者のための，ヤングの図式の紹介を目的としている．必ずしもすべての導出を提示しているのではない．規則がその導出より簡単な場合がよくあるが，これもその一つである．

ここに含まれる基本的技法を説明するために，再び2電子系のスピン状態を考える．スピン三重項状態の三つの可能な方向に対応して，三つの対称的状態がある．またスピン一重項に対応して反対称的状態が一つある．個々の電子のスピン状態は，一つの箱で表わされる．スピン上向きに対しては $\boxed{1}$ を用い，スピン下向きには $\boxed{2}$ を用いる．これらの箱は SU(2)の基本要素（*primitive object*）である．一つの箱は二重項を表わす．

対称的図式を $\square\square$ で，反対称的図式を $\begin{array}{|c|}\hline \ \\ \hline \ \\ \hline\end{array}$ で定義する．2電子系のスピン状態に適用したとき， $\square\square$ はスピン三重項に対するヤングの図式で，一方 $\begin{array}{|c|}\hline \ \\ \hline \ \\ \hline\end{array}$ はスピン一重項に対するヤングの図式である． $\boxed{1}$ と $\boxed{2}$ とに戻ると三つの三重項状態を次のように作り上げることができる：

$$\square\square\left\{\begin{array}{|c|c|}\hline 1 & 1 \\ \hline 1 & 2 \\ \hline 2 & 2 \\ \hline\end{array}\right. \tag{6.5.1}$$

$\begin{array}{|c|c|}\hline 2 & 1 \\ \hline\end{array}$ を考えないわけは，箱を水平に並べたときにはいつも対称的であると理解するからである．そこで重要な規則が引き出せる：左から右へ進むとき数字（ラベル）が減らないようにしておけば，二重に数えることが防げる．

反対称のスピン一重項については

$$\begin{array}{|c|}\hline 1 \\ \hline 2 \\ \hline\end{array} \tag{6.5.2}$$

が唯一の可能性である．$\begin{array}{|c|}\hline 1\\\hline 1\\\hline\end{array}$ や $\begin{array}{|c|}\hline 2\\\hline 2\\\hline\end{array}$ は反対称性の要請があるので不可能である．垂直な図式では対称的状態はあり得ない．さらに $\begin{array}{|c|}\hline 2\\\hline 1\\\hline\end{array}$ は二重に数えるのを避けるため捨てられる．そこで不必要な反対称的状態を消去するため，数字（ラベル）が下に行くほど増加するように要請する．

一般的規則として次のようにとる．ヤングの図式を描くとき左から右へ数字が減ることはできない．下へ降りるとき数字は増加しなければならない．我々はこの規則を2電子のスピン状態を考察して推論したが，この規則はどんな図式を構成するのにも適用可能であることを証明できる．

次に3電子を考えよう．完全に対称的なスピン状態を，上の規則から構成することができる：

$$\begin{array}{|c|c|c|}\hline \ \ & \ \ & \ \ \\\hline\end{array}\ \left\{\begin{array}{|c|c|c|}\hline 1&1&1\\\hline 1&1&2\\\hline 1&2&2\\\hline 2&2&2\\\hline\end{array}\right. . \tag{6.5.3}$$

この方法は4個の状態を共に与える．これはちょうど $j=\dfrac{3}{2}$ 状態の多重度である．これらが明らかに対称的であることは，3個のスピンがすべて z-軸の正方向にそろった $m=\dfrac{3}{2}$ の場合を見ると分かる．

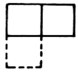
完全に反対称的な状態に関してはどうであろう．垂直方向の図式として試みに

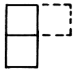
$$\begin{array}{|c|}\hline 1\\\hline 1\\\hline 1\\\hline\end{array}\quad \text{または}\quad \begin{array}{|c|}\hline 1\\\hline 2\\\hline 2\\\hline\end{array}$$

としてみる．しかし，数字は下に行くほど増えなければならないので，これは規則違反である．3電子のスピン状態に対して完全反対称は不可能であるから，これは驚くに当らない．ごく一般的に完全反対称であるための必要（もちろん十分ではないが）条件として，すべての状態が異ならなければならない．事実SU(2)では垂直の列に3個の箱を並べることができない．

ここで $\begin{array}{|c|c|}\hline \ &\ \\\hline \ \\\cline{1-1}\end{array}$. のような形の混合対称の図式を定義する．このような図式は対称的図式に一つの箱をつけた［(6.5.4a)式のように］とも，反対称的図

式に一つの箱をつけた［(6.5.4b)式のように］とも見ることができる．


(6.5.4a)


(6.5.4b)

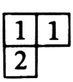
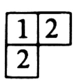
3電子のスピン関数が二つの指標 (*index*) に関して対称であるとすると，この中のどちらも第3の指標と反対称になることができない．たとえば

$$(|+>_1|->_2+|->_1|+>_2)|->_3 \qquad (6.5.5)$$

は $1 \leftrightarrow 2$ に関し対称性を満たすが，$1 \leftrightarrow 3$（ないし $2 \leftrightarrow 3$）に関しては対称的でも反対称的でもない．(6.5.5)から1と3をいれかえたものを引いて，$1 \leftrightarrow 3$ の下での反対称性を無理に作ることもできよう：

$$\begin{aligned}&|+>_1|->_2|->_3-|+>_3|->_2|->_1\\&\quad+|->_1|+>_2|->_3-|->_3|+>_2|->_1\\&=(|+>_1|->_3-|->_1|+>_3)|->_2.\end{aligned} \qquad (6.5.6)$$

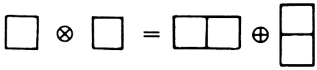
これは $1 \leftrightarrow 3$ の下で反対称性を満たすが，$1 \leftrightarrow 2$ の下ではじめ持っていた対称性はもう存在しない．いずれにせよ  の次元数は2である．すなわち，これは二重項 $(j=\frac{1}{2})$ を表わす．以上は，このような図式がスピン二重項（□）とスピン三重項(□□)の角運動量の和に対応することに気付くと理解できる．完全対称な四重項□□□はもう使ってしまっているので，残りは二重項でなければならない．別の見方では(6.5.4b)のように二重項（□）を一重項（）につけたとしてもよい．その積は明らかに二重項である．したがってどのように考えるにせよ， は二重項を表わさなければならない．しかしこれは正に図式を作る前述の規則が与える結果である．水平方向に数字が減少できず，垂直方向には増加しなければならないとしたら，唯一の可能性は

 と 
(6.5.7)

である．２つの可能性しかないから， は二重項に対応しなければならない． は考えないことに注意しよう．

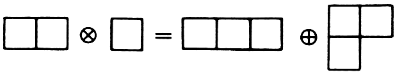
クレプシュ-ゴルダン級数や角運動量の合成は，この図式で次のように考えられる：

$$\mathscr{D}^{(1/2)} \otimes \mathscr{D}^{(1/2)} = \mathscr{D}^{(1)} \oplus \mathscr{D}^{(0)}$$



$(\mathbf{2} \times \mathbf{2} = \mathbf{3} + \mathbf{1})$

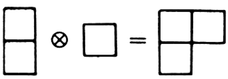
$$\mathscr{D}^{(1)} \otimes \mathscr{D}^{(1/2)} = \mathscr{D}^{(3/2)} \oplus \mathscr{D}^{(1/2)}$$



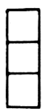
$(\mathbf{3} \times \mathbf{2} = \mathbf{4} + \mathbf{2})$

(6.5.8)

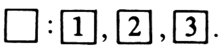
$$\mathscr{D}^{(0)} \otimes \mathscr{D}^{(1/2)} = \mathscr{D}^{(1/2)}$$



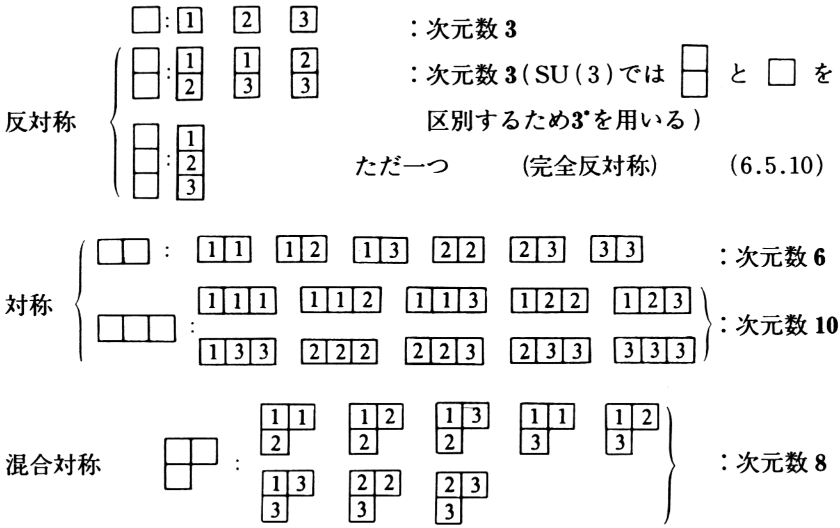
$(\mathbf{1} \times \mathbf{2} = \mathbf{2})$

（ はできないことに注意）

我々の考察を基本要素が３個の場合に拡げよう．１つの箱には三つの可能性がある：

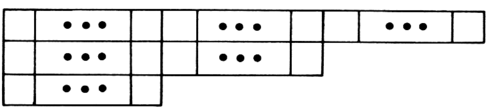
　(6.5.9)

１，２，３のラベルは原子物理での p - 軌道の磁気量子数を表わしてもよいし，パイ中間子の荷電状態 π^+，π^0，π^- を表わしていても，あるいは素粒子の SU(3)を用いた分類で u，d，s のクォークを表わしてもよい．２個の基本要素を用いて推定した規則が３個の場合に拡張でき，**次元数**といった量を算出するのに使えると仮定しよう．そしてこのときすべてがうまくいくかどうかを検討する．



(6.5.10)

これらの図式はSU(3)の表現に対応し，一般に次のような形である：



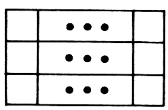
第1行にλ_1個の箱

第2行にλ_2個の箱

第3行にλ_3個の箱

(6.5.11)

次元数を数える目的では (6.5.11) の左側の“一重項”



(6.5.12)

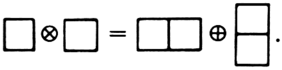
を削っても構わない．次元数は $p=\lambda_1-\lambda_2$，$q=\lambda_2-\lambda_3$ として

$$d(\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3)=\frac{(p+1)(q+1)(p+q+2)}{2} \tag{6.5.13}$$

であることが示せる．

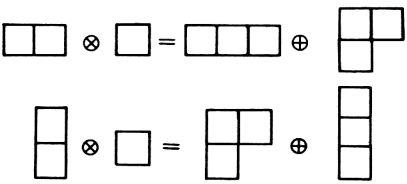
SU(3)の言葉を借りると，SU(3)のある決まった既約表現に一つの図

式が対応する．一方各々の箱が $j=1$ の要素を意味するものと解釈するとき，一つの図式に回転群の既約表現［訳注：j がある決まった値をとる．］は対応しない．この点をもっとはっきりと議論してみよう．はじめにそれぞれ $j=1$ の状態を表わす２個の箱を一緒にする：

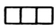
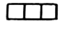
　　$(\mathbf{3}\times\mathbf{3}=\mathbf{6}+\mathbf{3})$　(6.5.14)

水平な図式には六つの状態がある．この図式は $j=2$（多重度５）と $j=0$（多重度１）に分けることができ，共に対称的である．実際これは２個のベクトルから対称的な２階テンソルを構成する様子と同じである．垂直な図式  には $\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{b}$ のように振舞う $j=1$ の反対称的状態が対応する．

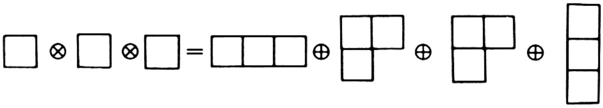
三つの角運動量を合成する問題を $j_1=j_2=j_3=1$ に対して解くために，まず



$(\mathbf{6}\times\mathbf{3}=\mathbf{10}+\mathbf{8})$
$(\mathbf{3}\times\mathbf{3}=\mathbf{8}+\mathbf{1})$　(6.5.15)

のような計算をしておく．  がどのように分解されるかを調べるために，これに $j=3$ が含まれていなければならないことに着目する．しかしこれが唯一の完全対称な状態ではない．$\boldsymbol{a}(\boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{c})+\boldsymbol{b}(\boldsymbol{c}\cdot\boldsymbol{a})+\boldsymbol{c}(\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b})$ もまた完全対称であり，$j=1$ の変換性を持っている．つまり  は $j=3$（７個の状態）と $j=1$（３個の状態）を含んでいる．全部で８通りの可能性がある  については，議論はもっと込みいっている．しかしこの $\mathbf{8}$ が $\mathbf{7}+\mathbf{1}$ には分解できないことに注意しよう．$\mathbf{8}$ が混合対称であると分かっているのに $\mathbf{7}$ は完全対称［訳注：$j=3$］，$\mathbf{1}$ は完全反対称［訳注：$j=0$］であるからである．そこで他の唯一の可能性は $\mathbf{8}=\mathbf{5}+\mathbf{3}$ である．いいかえれば $j=2$ と $j=1$ である．

したがって結局

　(6.5.16)

$$
\begin{array}{ccccccccccc}
3 \times 3 \times 3 & = & 10 & + & 8 & + & 8 & + & 1 \\
 & & \uparrow & & \uparrow & & \uparrow & & \\
 & & 7+3 & & 5+3 & & 5+3 & &
\end{array}
$$

が成立する．角運動量状態については

$j=3$　(次元数7)　1回　(完全対称)
$j=2$　(次元数5)　2回　(両者とも混合対称)
$j=1$　(次元数3)　3回　(一つは完全対称，他の二つは混合対称)
$j=0$　(次元数1)　1回　(完全反対称)　(6.5.17)

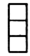
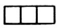
となる．$j=0$ の状態が一つしかないことは，$\boldsymbol{a}$，$\boldsymbol{b}$，$\boldsymbol{c}$ の積で回転の下で不変なのは $\boldsymbol{a}\cdot(\boldsymbol{b}\times\boldsymbol{c})$ だけであることに対応する．これは必然的に反対称である．また $j=1$ の状態をテンソルの方法を用いて調べることもできる．$\boldsymbol{a}$，$\boldsymbol{b}$，$\boldsymbol{c}$ から構成される三つの独立なベクトルがあり，それらは $\boldsymbol{a}(\boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{c})$，$\boldsymbol{b}(\boldsymbol{c}\cdot\boldsymbol{a})$ および $\boldsymbol{c}(\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b})$ である．これらを用いて完全対称な結合がただ一つ作れる：

$$\boldsymbol{a}(\boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{c})+\boldsymbol{b}(\boldsymbol{c}\cdot\boldsymbol{a})+\boldsymbol{c}(\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b}). \qquad (6.5.18)$$

以上の考察を窒素原子 N [$Z=7$，殻構造 $(1s)^2(2s)^2(2p)^3$]の $(2p)^3$ 電子配置に適用することができる．状態数は全部で

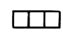
$$\frac{6!}{3!\,3!}=\frac{6\cdot5\cdot4}{3\cdot2\cdot1}=20 \qquad (6.5.19)$$

だけある．[訳注：p 軌道 ($l=1$) にはスピン状態を含め $2\cdot(2l+1)=6$ 個の異なる1電子状態がある．パウリの原理をみたす ${}_6C_3=20$ 個の3電子状態を以下，角運動量で分類する．] 空間関数で全軌道角運動量 $l_{\text{tot}}=3$ を持ち □□□ のような性質のものは，完全反対称のスピン関数と結合しなければならないこ

とになるので，実際にありえない．3電子のスピン状態として  は，各々の箱がスピン上向きないし下向き状態を表わすとき，不可能であることを思い出せ．これと対照的に完全反対称の空間関数  は $l_{\mathrm{tot}}=0$ を持ち，完全対称のスピン関数  と結合すれば全く問題ない．後者の全スピン角運動量は $\frac{3}{2}$ であり，この電子配置は $^4S_{3/2}$ である[†]．混合対称の空間関数 （$l_{\mathrm{tot}}=2, 1$）は，混合対称のスピン関数，必然的にスピン二重項の  と結合しなければならない．この状態は $^2D_{5/2}$, $^2D_{3/2}$ および $^2P_{3/2}$, $^2P_{1/2}$ である．状態数を数えると

$$
\begin{array}{ll}
j=\frac{5}{2} & 6\text{状態} \\
j=\frac{3}{2} & 4\times 3\text{状態} \\
j=\frac{1}{2} & 2\text{状態} \\
\hline
 & 20\text{状態}
\end{array}
\tag{6.5.20}
$$

となり，この合計は先に数えた結果と一致する．

最後に素粒子物理への応用を考えよう．ここではSU(3)の考えを非相対論的クォーク模型に適用する．この模型の基本要素は u, d, s（アップ，ダウン，ストレインジの略で，アップ，ダウンとはアイソスピンの上向き，下向きの意味）である．一つの箱はいま u, d あるいは s を表わす． **(10)** で表わされる10重項に注目する：

$$
\begin{array}{lll}
\Delta^{++,+,0,-} & ddd\ udd\ uud\ uuu & I=\frac{3}{2} \\
\Sigma^{+,0,-} & dds\ uds\ uus & I=1 \\
\Xi^{0,-} & dss\ uss & I=\frac{1}{2} \\
\Omega^{-} & sss & I=0
\end{array}
\tag{6.5.21}
$$

ここで I はアイソスピンを表わす．

[†] 訳注：$^4S_{3/2}$ の分光学的記号で左上の添字は全スピンの多重度，大文字は全軌道角運動量，右下の添字は全合成角運動量 j を表わす．

さてこの10個の状態はすべてスピン j が $\frac{3}{2}$ の素粒子であることが分かっている．3個のクォークのエネルギーの低い励起状態に対しては，空間部分が相対座標で S-状態にあると仮定してよい．スピンの自由度に関しては完全対称性が期待される．たとえば Δ の $j=\frac{3}{2}$，$m=\frac{3}{2}$ の状態はクォークのスピンがすべてそろっている状態と見ることができる．

ところでクォークはスピン $\frac{1}{2}$ の粒子であるからフェルミ-ディラック統計により全体として反対称性が期待される．しかし $j \doteq \frac{3}{2}$ の10重項では

$$
\begin{array}{lll}
\text{クォークのラベル（フレーバーと呼ばれている）：} & \text{対称} & \\
\text{スピン：} & \text{対称} & \qquad (6.5.22) \\
\text{空間：} & \text{対称} &
\end{array}
$$

である．この式から明白なように，この場合の全対称性は偶である！　これは人々を“統計パラドックス”に導いた．非相対論的クォーク模型は他の面でとても成功していたので，これには特に当惑させられた．

この板ばさみから抜け出す道は，実際にはもう一つ自由度があると仮定することである．これがカラー（赤 R，青 B，黄 Y）と呼ばれる自由度であって，観測されているハドロン（ここで考察した $j=\frac{3}{2}^{+}$ の状態を含む強く相互作用する粒子[†]）は**カラーの一重項**

$$
\frac{1}{\sqrt{6}}(|\mathbf{RBY}>-|\mathbf{BRY}>+|\mathbf{BYR}>-|\mathbf{YBR}>+|\mathbf{YRB}>-|\mathbf{RYB}>) \qquad (6.5.23)
$$

にあると仮定する．これは(6.5.10)中にただ一つある

$$
\begin{array}{|c|}\hline 1 \\ \hline 2 \\ \hline 3 \\ \hline \end{array}
$$

† 訳注：$\frac{3}{2}^{+}$ の＋はパリティ偶をあらわす．

と全く類似した項で，カラー空間での完全反対称な結合である．統計の問題はこれで解決した．なぜなら

$$P_{ij} = P_{ij}^{(\text{フレーバー})} P_{ij}^{(\text{スピン})} P_{ij}^{(\text{空間})} P_{ij}^{(\text{カラー})} \tag{6.5.24}$$

$$(-) \quad (+) \quad (+) \quad (+) \quad (-)$$

となるからである．

カラーの導入はジレンマから抜け出す安易な道ではないかと批判することもできよう．幸いにしてカラーの存在に有利な証拠が他にもいくつかあった．π^0 中間子の崩壊率や，電子と陽電子が対消滅しハドロンが生成する断面積などである．実際にこれは，困難を克服しようとする試みから自明でないカラーの予言がどのように導かれたかを示す非常によい例である．

問　題

1．a．スピン 1/2 を持つ N 個の同一種類の粒子が，1 次元調和振動子のポテンシャルの影響を受けている．基底状態のエネルギーはいくらか．フェルミエネルギーはいくらか．

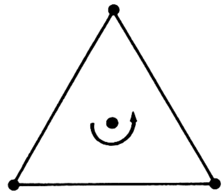
　b．粒子間の相互作用を無視し N を非常に大きいと仮定したとき，基底状態のエネルギーとフェルミエネルギーはいくらか．

2．同一種類ではない 2 個のスピン 1 の粒子が軌道角運動量を持たないとき（すなわち，ともに s-状態のとき），$j=0$，$j=1$，$j=2$ の合成角運動量が作れるのは明らかである．ここで 2 粒子が同一であると仮定すると，どのような制限がつくか．

3．もし電子がスピンを持たないボソンだとすると，ヘリウム原子のエネルギー準位にはどのようなことが起こるであろうか．できるだけ定量的に検討せよ．

4．3 個のスピン 0 の同一種類の粒子が正三角形の頂点に位置している．z-

軸をこの三角形の重心を通り面と垂直方向に向くように定義する．系全体は z-軸のまわりを自由に回転できる．統計的考察により，J_z に対応する磁気量子数についての制限を求めよ．



5．弱く相互作用している 3 個の同一種類のスピン 1 の粒子を考える．

a．状態ベクトルの空間部分は，任意の対の交換に関して対称的であることが分かっているとしよう．$|+\rangle|0\rangle|+\rangle$ は粒子 1 が $m_s=+1$，粒子 2 が $m_s=0$，粒子 3 が $m_s=+1$ であることを表わす．このような記号を用いて次の三通りの場合に，規格化されたスピン状態を構成せよ．

(i) 3 粒子ともすべて $|+\rangle$ 状態にある，

(ii) 2 粒子が $|+\rangle$，1 粒子が $|0\rangle$ 状態にある，

(iii) 3 粒子とも異なるスピン状態にある．

全スピンはそれぞれの場合にいくらか．

b．同じ問題を，任意の対の交換に関して空間部分が反対称であるときに検討せよ．

6．電子がフェルミ・ディラック統計に従うスピン 3/2 の粒子であったとする．このような“電子”からなる仮想的な Ne 原子（$Z=10$）の電子配置を表わせ [すなわち $(1s)^2(2s)^2(2p)^6$ のように]．この配置は大いに縮退していることを示せ．この仮想的 Ne 原子の基底状態（最低項）は，交換分裂やスピン-軌道分裂を考慮したとき，分光学的記号 $^{2S+1}L_J$（S，L，J はそれぞれ全スピン，全軌道角運動量および全角運動量を表わす）でどのように表わされるか．

7．2 個の同一種類のスピン 1/2 のフェルミオンが，無限に高い障壁ポテン

シャル（$x<0,\ x>L$ に対して $V=\infty$，$0\leq x\leq L$ に対して $V=0$）の間を 1 次元的に運動している．

a.　2 粒子が三重項スピン状態（オルソ状態）になっているとき，基底状態の波動関数と基底状態のエネルギーとを表わせ．

b.　一重項スピン状態（パラ状態）のとき (a) と同じ問題を検討せよ．

c.　つぎに非常に到達距離が短く

$$V=-\lambda\delta(x_1-x_2)\qquad(\lambda>0)$$

で近似できる引力ポテンシャルを通じて 2 粒子が相互作用していると仮定する．このような特異的ポテンシャルに対しても摂動論が有効であると仮定して，(a)，(b) で得られたエネルギー準位がどのようになるかを半定量的に議論せよ．

第７章

散乱理論

本書のこの最後の章ではもっぱら散乱理論，もっと一般的にいえば衝突過程を取扱う．この主題の重要性は，いくら強調しても強調しすぎることがない．

7.1　リップマン-シュウィンガー方程式

時間を含まない散乱過程の理論から始めよう．ハミルトニアンが

$$H = H_0 + V \tag{7.1.1}$$

のように表わせると仮定する．ここで H_0 は運動エネルギー演算子

$$H_0 = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} \tag{7.1.2}$$

である．散乱体がなければ V はゼロであり，エネルギー固有状態はちょうど自由粒子状態 $|\boldsymbol{p}>$ である．V の存在により，エネルギー固有状態は自由粒子状態から異なるようになる．しかし散乱過程が弾性的であると――すなわちエネルギー変化がないと――我々の関心は $V=0$ と同じエネルギー固有値を持つ全ハミルトニアンに対する，シュレーディンガー方程式の解を求めることにある．具体的に $|\phi>$ を H_0 のエネルギー固有ケットとしよう：

$$H_0|\phi> = E|\phi>. \tag{7.1.3}$$

（ここで $|\boldsymbol{p}>$ ではなく $|\phi>$ を用いる．のちに平面波状態でなく自由な球面波を扱うことがあるからである．$|\phi>$ はどちらの状態をも表わせる.）解きた

いシュレーディンガー方程式は

$$(H_0 + V)|\psi> = E|\psi> \tag{7.1.4}$$

である．H_0 も $H_0 + V$ も連続的エネルギースペクトルを示す．求める(7.1.4)の解は $V \to 0$ のとき $|\psi> \to |\phi>$ となるもので，$|\phi>$ は同じエネルギー固有値を持つ自由粒子のシュレーディンガー方程式（7.1.3）の解である．

求めている解は

$$|\psi> = \frac{1}{E - H_0} V|\psi> + |\phi> \tag{7.1.5}$$

であると，演算子 $1/(E - H_0)$ の特異性からくる複雑さに目をつぶればいえるかも知れない．このことは $E - H_0$ を(7.1.5)にかけると，直ちに正しい方程式(7.1.4)が得られることに注意するとわかる．(7.1.5)に $|\phi>$ があることも，V がゼロになるとき $|\psi>$ が $|\phi>$ に戻らなければならないことからもっともである．しかし特異性のある演算子を扱う処方がなければ，(7.1.5)のような型の方程式は意味不明である．時間を含まない摂動論で用いた上手な方法——補足的な射影演算子をはさむことなど（5.1節を見よ）——は $|\phi>$ も $|\psi>$ も連続的固有値を示すこの場合には，うまくいかない．その代り今度は E をわずかに複素数にすることで，解が明白に指定される：

$$|\psi^{(\pm)}> = |\phi> + \frac{1}{E - H_0 \pm i\varepsilon} V|\psi^{(\pm)}> . \tag{7.1.6}$$

これは**リップマン-シュウィンガー方程式**と呼ばれるものである．式中の ± の物理的意味は，遠方での $<\boldsymbol{x}|\psi^{(\pm)}>$ を調べることによって後に議論する．

リップマン-シュウィンガー方程式は特別な表示に依らないケット方程式である．いま位置基底に限定して，左から $<\boldsymbol{x}|$ をかけると

$$<\boldsymbol{x}|\psi^{(\pm)}> = <\boldsymbol{x}|\phi> + \int d^3x' <\boldsymbol{x} \left| \frac{1}{E - H_0 \pm i\varepsilon} \right| \boldsymbol{x}'>$$

$$\times \langle \boldsymbol{x}' | V | \psi^{(\pm)} \rangle \tag{7.1.7}$$

となる．未知のケット $|\psi^{(\pm)}\rangle$ が積分記号下に入っているので，これは散乱過程に関する**積分方程式**である．ここで $|\phi\rangle$ が運動量 $\boldsymbol{p}$ の平面波状態を表わすなら

$$\langle \boldsymbol{x} | \phi \rangle = \frac{e^{i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}/\hbar}}{(2\pi\hbar)^{3/2}}, \tag{7.1.8}$$

あるいはこの代りに箱の中での規格化を用いて

$$\langle \boldsymbol{x} | \phi \rangle = \frac{e^{i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x}/\hbar}}{L^{3/2}} \tag{7.1.9}$$

と書ける．一方リップマン-シュウィンガー方程式を運動量基底を用いて表わすと

$$\langle \boldsymbol{p} | \psi^{(\pm)} \rangle = \langle \boldsymbol{p} | \phi \rangle + \frac{1}{E - (p^2/2m) \pm i\varepsilon} \langle \boldsymbol{p} | V | \psi^{(\pm)} \rangle \tag{7.1.10}$$

が得られる．この方程式は 7.2 節で扱うことにしよう．

位置基底を用いることにして(7.1.7)式を検討しよう．先に進むにはまず

$$G_{\pm}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}') \equiv \frac{\hbar^2}{2m} \left\langle \boldsymbol{x} \left| \frac{1}{E - H_0 \pm i\varepsilon} \right| \boldsymbol{x}' \right\rangle \tag{7.1.11}$$

で定義される積分方程式の核を計算しなければならない．この $G_{\pm}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}')$ は $E \equiv \hbar^2 k^2/2m$ として

$$G_{\pm}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}') = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{\pm ik|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|}}{|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}'|} \tag{7.1.12}$$

で与えられる．これを示すには(7.1.11)を次のように計算する：

$$\frac{\hbar^2}{2m} \left\langle \boldsymbol{x} \left| \frac{1}{E - H_0 \pm i\varepsilon} \right| \boldsymbol{x}' \right\rangle = \frac{\hbar^2}{2m} \int d^3p' \int d^3p'' \langle \boldsymbol{x} | \boldsymbol{p}' \rangle$$

$$\times <\boldsymbol{p}'\left|\frac{1}{E-(\boldsymbol{p}'^2/2m)\pm i\varepsilon}\right|\boldsymbol{p}''><\boldsymbol{p}''|\boldsymbol{x}'> . \tag{7.1.13}$$

ここで H_0 は $<\boldsymbol{p}'|$ にかかっている．次に

$$<\boldsymbol{p}'\left|\frac{1}{E-(\boldsymbol{p}'^2/2m)\pm i\varepsilon}\right|\boldsymbol{p}''>=\frac{\delta^{(3)}(\boldsymbol{p}'-\boldsymbol{p}'')}{E-(\boldsymbol{p}'^2/2m)\pm i\varepsilon} ,$$

$$<\boldsymbol{x}|\boldsymbol{p}'>=\frac{e^{i\boldsymbol{p}'\cdot\boldsymbol{x}/\hbar}}{(2\pi\hbar)^{3/2}} ,\quad <\boldsymbol{p}''|\boldsymbol{x}'>=\frac{e^{-i\boldsymbol{p}''\cdot\boldsymbol{x}'/\hbar}}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \tag{7.1.14}$$

を用いると(7.1.13)式の右辺は

$$\frac{\hbar^2}{2m}\int\frac{d^3p'}{(2\pi\hbar)^3}\frac{e^{i\boldsymbol{p}'\cdot(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')/\hbar}}{[E-(\boldsymbol{p}'^2/2m)\pm i\varepsilon]} \tag{7.1.15}$$

となる．ここで $E=\hbar^2k^2/2m$ と書き $\boldsymbol{p}'\equiv\hbar\boldsymbol{q}$ と置くと(7.1.15)式は

$$\frac{1}{(2\pi)^3}\int_0^\infty q^2dq\int_0^{2\pi}d\phi\int_{-1}^{+1}\frac{d(\cos\theta)e^{i|\boldsymbol{q}||\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|\cos\theta}}{k^2-q^2\pm i\varepsilon}$$

$$=-\frac{1}{8\pi^2}\frac{1}{i|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dqq(e^{iq|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|}-e^{-iq|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|})}{q^2-k^2\mp i\varepsilon}$$

$$=-\frac{1}{4\pi}\frac{e^{\pm ik|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|}}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|} \tag{7.1.16}$$

となる．最後の変形では，被積分関数が複素 q-平面内の

$$q=\pm k\sqrt{1\pm\left(\frac{i\varepsilon}{k^2}\right)}\simeq\pm(k\pm i\varepsilon') \tag{7.1.17}$$

で極を持つことに注意して，留数の計算を用いた．読者はこの $G_\pm$ がヘルムホルツ方程式

$$(\nabla^2+k^2)G_\pm(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}')=\delta^{(3)}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}') \tag{7.1.18}$$

のグリーン関数に他ならないことに気づいたことであろう．(7.1.12)式のような具体的な $G_\pm$ の表式が求まると，(7.1.11)を用いて方程式(7.1.7)は

$$\langle \boldsymbol{x}|\psi^{(\pm)}\rangle = \langle \boldsymbol{x}|\phi\rangle - \frac{2m}{\hbar^2}\int d^3x' \frac{e^{\pm ik|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|}}{4\pi|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|}\langle \boldsymbol{x}'|V|\psi^{(\pm)}\rangle \quad (7.1.19)$$

のように書きかえられる．散乱体のあるときの波動関数 $\langle \boldsymbol{x}|\psi^{(\pm)}\rangle$ が，入射波の波動関数 $\langle \boldsymbol{x}|\phi\rangle$ と散乱の効果を表わす項の和として書かれることに注意しよう．のちに具体的に分かるように，第２項の空間依存性は，ポテンシャルのおよぶ範囲が有限である限り，十分に遠く離れたところで $e^{\pm ikr}/r$ である．すなわち正の符号（負の符号）を持つ解は，平面波に外向き（内向き）球面波が加わった波に対応する．ほとんどの物理の問題では正符号の解に興味がある．負符号の解に適応する境界条件を満足する系を準備することは，困難であるからである．

もっと具体的に $\langle \boldsymbol{x}|\psi^{(\pm)}\rangle$ の様子を調べるために，V が $\boldsymbol{x}$-表示で対角的である局所的ポテンシャルの場合を考えよう．位置演算子のみの関数であるようなポテンシャルが，この部類に属する．厳密な意味で V が**局所的**であるといわれるのは

$$\langle \boldsymbol{x}'|V|\boldsymbol{x}''\rangle = V(\boldsymbol{x}')\delta^{(3)}(\boldsymbol{x}'-\boldsymbol{x}'') \quad (7.1.20)$$

と書けるときである．この結果

$$\begin{aligned}\langle \boldsymbol{x}'|V|\psi^{(\pm)}\rangle &= \int d^3x''\langle \boldsymbol{x}'|V|\boldsymbol{x}''\rangle\langle \boldsymbol{x}''|\psi^{(\pm)}\rangle \\ &= V(\boldsymbol{x}')\langle \boldsymbol{x}'|\psi^{(\pm)}\rangle \quad (7.1.21)\end{aligned}$$

が得られる．すると積分方程式(7.1.19)は

$$\langle \boldsymbol{x}|\psi^{(\pm)}\rangle = \langle \boldsymbol{x}|\phi\rangle - \frac{2m}{\hbar^2}\int d^3x' \frac{e^{\pm ik|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|}}{4\pi|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|}V(\boldsymbol{x}')$$

$$\times \langle \boldsymbol{x}'|\psi^{(\pm)}\rangle \quad (7.1.22)$$

と簡単化される．この方程式の中に含まれている物理を解釈してみよう．ベクトル $\boldsymbol{x}$ は波動関数を評価する観測点の方向に向いている．範囲の有限なポテンシャルでは，ゼロでない寄与を与える領域は空間的に限られている．散乱過程で我々に興味があるのは，ポテンシャルの到達距離よりはるかに外にある点における，散乱体（すなわち範囲の有限なポテンシャル）の効果を調べることである．これは実際的観点からも，散乱中心のすぐ近くに検出器を置くことはできないので，もっともである．観測はいつも，ポテンシャルのおよぶ範囲にくらべて散乱体からずっと遠い距離 r のところに置かれた検出器によって行われる．いいかえれば図7.1に示されているように

$$|\boldsymbol{x}| \gg |\boldsymbol{x}'| \tag{7.1.23}$$

としてさしつかえない．

すると次のような記号

$$\begin{aligned} r &= |\boldsymbol{x}| \\ r' &= |\boldsymbol{x}'| \end{aligned} \tag{7.1.24}$$

および

$$\alpha = \angle(\boldsymbol{x},\ \boldsymbol{x}') \tag{7.1.25}$$

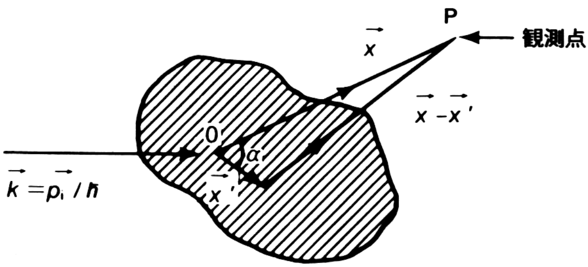


図 7.1.　到達距離が有限な散乱ポテンシャル．観測点 P は波動関数 $\langle \boldsymbol{x}|\psi^{(\pm)}\rangle$ の値を求める場所である．一方，等式(7.1.22)の積分へ寄与するのは図中で斜線をつけたポテンシャルの到達範囲内の $|\boldsymbol{x}'|$ である．

を導入して，$r \gg r'$ に対し

$$|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'| = \sqrt{r^2 - 2rr'\cos\alpha + r'^2}$$

$$= r\left(1 - \frac{2r'}{r}\cos\alpha + \frac{r'^2}{r^2}\right)^{1/2}$$

$$\simeq r - \hat{\boldsymbol{r}}\cdot\boldsymbol{x}' \tag{7.1.26}$$

が得られる．ここで

$$\hat{\boldsymbol{r}} \equiv \frac{\boldsymbol{x}}{|\boldsymbol{x}|} \tag{7.1.27}$$

である．さらに

$$\boldsymbol{k}' \equiv k\hat{\boldsymbol{r}} \tag{7.1.28}$$

を定義する．こう定義する動機は，$\boldsymbol{k}'$ が観測点 $\boldsymbol{x}$ へ到る波の進行ベクトルを表わすからである．すると r が大きいとき

$$e^{\pm ik|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|} \simeq e^{\pm ikr}\, e^{\mp i\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{x}'} \tag{7.1.29}$$

が得られる．また $1/|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|$ を単に $1/r$ で置き換えてもさしつかえない．さらに $1/(2\pi\hbar)^{3/2}$ のような因子から $\hbar$ を除くために，$|\boldsymbol{p}_i\rangle$ でなくて

$$\boldsymbol{k} \equiv \frac{\boldsymbol{p}_i}{\hbar} \tag{7.1.30}$$

で指定される $|\boldsymbol{k}\rangle$ を用いるのが便利である．$|\boldsymbol{k}\rangle$ は

$$\langle\boldsymbol{k}|\boldsymbol{k}'\rangle = \delta^{(3)}(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}') \tag{7.1.31}$$

のように規格化されるので

$$\langle\boldsymbol{x}|\boldsymbol{k}\rangle = \frac{e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}}{(2\pi)^{3/2}} \tag{7.1.32}$$

である．したがって最終的に

$$<\boldsymbol{x}|\psi^{(+)}> \xrightarrow{r\ 大} <\boldsymbol{x}|\boldsymbol{k}> - \frac{1}{4\pi}\frac{2m}{\hbar^2}\frac{e^{ikr}}{r} \times \int d^3x' e^{-i\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{x}'} V(\boldsymbol{x}')<\boldsymbol{x}'|\psi^{(+)}>$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\left[e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}} + \frac{e^{ikr}}{r}f(\boldsymbol{k}', \boldsymbol{k})\right] \tag{7.1.33}$$

が得られる．この式の形は $\boldsymbol{k}$ 方向に進行するはじめの平面波に加えて，振幅 $f(\boldsymbol{k}', \boldsymbol{k})$ が

$$f(\boldsymbol{k}', \boldsymbol{k}) \equiv -\frac{1}{4\pi}\frac{2m}{\hbar^2}(2\pi)^3\int d^3x' \frac{e^{-i\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{x}'}}{(2\pi)^{3/2}} V(\boldsymbol{x}')<\boldsymbol{x}'|\psi^{(+)}>$$

$$= -\frac{1}{4\pi}(2\pi)^3\frac{2m}{\hbar^2}<\boldsymbol{k}'|V|\psi^{(+)}> \tag{7.1.34}$$

で与えられる外向きの球面波があることを明確にしている．［訳注：これを**散乱振幅**という.］同じように(7.1.22)と(7.1.29)から容易に示せるように，$<\boldsymbol{x}|\psi^{(-)}>$ には $\boldsymbol{k}$ を進行方向とするはじめの平面波に加えて，空間依存性が e^{-ikr}/r で振幅が $-(1/4\pi)(2\pi)^3(2m/\hbar^2)<-\boldsymbol{k}'|V|\psi^{(-)}>$ の内向きの球面波が対応する．

微分断面積 $d\sigma/d\Omega$ を得るには，すべて(7.1.32)の波動関数で特徴づけられる全く同じように用意された多数の粒子を考えるとよい．そして入射方向と垂直な平面の単位面積を，単位時間に通過する入射粒子の数がいくつかを数える．これは (7.1.33) 式の右辺第１項に由来する確率の流れ［(2.4.16)参照］に比例している．同じように，微小立体角要素 $d\Omega$ に対する微小面積 $r^2d\Omega$ を通る，散乱粒子数がいくつかを数えよう．明らかに

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}d\Omega = \frac{\text{単位時間に } d\Omega \text{ へ散乱される粒子数}}{\text{単位時間に単位面積を通過する入射粒子数}}$$

$$= \frac{r^2 d\Omega |\boldsymbol{j}_{散乱}|}{|\boldsymbol{j}_{入射}|} = |f(\boldsymbol{k}', \boldsymbol{k})|^2 d\Omega \tag{7.1.35}$$

である．したがって微分断面積は

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\boldsymbol{k}', \boldsymbol{k})|^2 \tag{7.1.36}$$

で与えられる．

波束による記述

ここで読者は我々が時間を含まない散乱の式を扱っているのを見て，これが散乱中心によってはね飛ばされる粒子の運動と一体関係するのかどうかを疑問に思うかもしれない．我々の用いた入射平面波は，空間的にも時間的にも無限に拡がっている．もっと現実的に記述するには，散乱中心に近づいていく波束を考える．（実はこれは難しい課題である！）*十分に時間がたつと，もともとの方向に進むはじめの波束に加えて外側へ運動する球面波の波面も存在する．図7.2を参照せよ．波束の寸法が散乱体の大きさ（すなわち V の到達範囲）に較べてずっと大きい限り，平面波を用いても実際に十分である．

7.2　ボルン近似

等式(7.1.34)は $f(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{k}')$ の表式に未知のケット $|\psi^{(+)}\rangle$ が現われているので，微分断面積を計算するのにまだすぐには使えない．散乱体の効果があまり強くないときは，$\langle \boldsymbol{x}'|\psi^{(+)}\rangle$（積分記号のもとに現われる）を $\langle \boldsymbol{x}'|\phi\rangle$ で置き換えること——すなわち

$$\langle \boldsymbol{x}'|\psi^{(+)}\rangle \to \langle \boldsymbol{x}'|\phi\rangle = \frac{e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}'}}{(2\pi)^{3/2}} \tag{7.2.1}$$

---

* 波束による解法についてのもっと詳しい説明は，M. L. Goldberger and K. M. Watson, *Collision Theory*, 第3章（New York: John Wiley, 1964）; R. G. Newton, *Scattering Theory of Waves and Particles*, 第6章（New York: McGraw-Hill, 1966）を参照せよ．

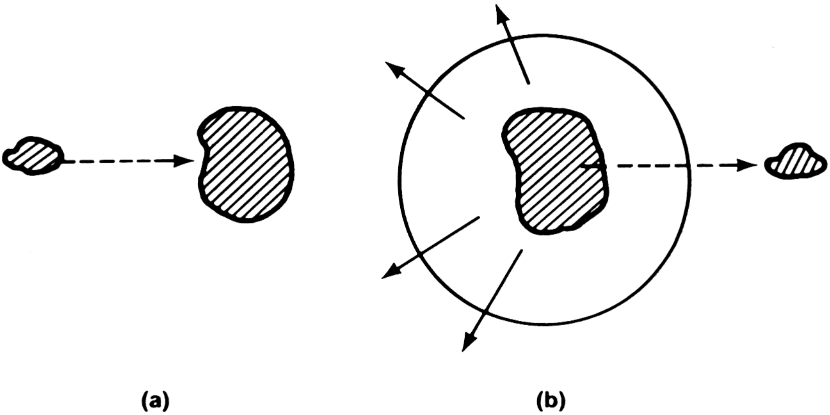


図 7.2. (a)衝突中心にはじめに近づいて行く入射波束.
(b)はじめと同じ方向に動き続ける入射波束と外向きの球状波面（時間が十分にたったあと）.

とすることは，そう悪い近似でないように思える．こうすると $f(\boldsymbol{k}', \boldsymbol{k})$ に対する近似的表現が得られる．ポテンシャル V を 1 次まで取り入れているので，こうして得られた近似的振幅を**1 次のボルン振幅**と呼び，$f^{(1)}$ と記す：

$$f^{(1)}(\boldsymbol{k}', \boldsymbol{k}) = -\frac{1}{4\pi}\frac{2m}{\hbar^2}\int d^3x' e^{i(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')\cdot\boldsymbol{x}'} V(\boldsymbol{x}') \quad . \qquad (7.2.2)$$

いいかえると，$-(2m/4\pi\hbar^2)$ の因子は別にして 1 次のボルン振幅は，ちょうどポテンシャル V の $\boldsymbol{q} \equiv \boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}'$ に関する 3 次元フーリエ変換である.

球対称ポテンシャルに対しては，$f^{(1)}(\boldsymbol{k}', \boldsymbol{k})$ は

$$|\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}'| \equiv q \equiv 2k\sin\frac{\theta}{2} \qquad (7.2.3)$$

で与えられる $|\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}'|$ の関数である．（エネルギー保存により $|\boldsymbol{k}'| = k$ であることを思い出せ.）[図7.3参照]　角度積分を実行すると

$$f^{(1)}(\theta) = -\frac{1}{2}\frac{2m}{\hbar^2}\frac{1}{iq}\int_0^\infty \frac{r^2}{r} V(r)(e^{iqr}-e^{-iqr})dr$$

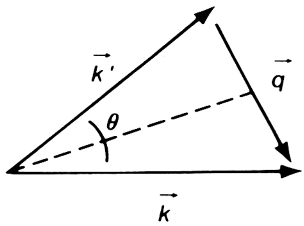


図 7.3. 偏角 θ の散乱. $\boldsymbol{q}=\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}'$ である.

$$= -\frac{2m}{\hbar^2}\frac{1}{q}\int_0^\infty rV(r)\sin qr\,dr \tag{7.2.4}$$

が得られる.

一例を述べよう. 湯川ポテンシャル

$$V(r) = \frac{V_0 e^{-\mu r}}{\mu r} \tag{7.2.5}$$

による散乱を考える. ここで V_0 は r に依存しない. また $1/\mu$ は, ある意味でポテンシャルの到達距離に対応する. V は $r \gg 1/\mu$ に対して急速にゼロになることに注意しよう. このポテンシャルに対しては(7.2.4)から

$$f^{(1)}(\theta) = -\left(\frac{2mV_0}{\mu\hbar^2}\right)\frac{1}{q^2+\mu^2} \tag{7.2.6}$$

が得られる. ここで

$$\mathrm{Im}\left[\int_0^\infty e^{-\mu r}e^{iqr}\,dr\right] = -\mathrm{Im}\left(\frac{1}{-\mu+iq}\right) = \frac{q}{\mu^2+q^2} \tag{7.2.7}$$

を用いた. また

$$q^2 = 4k^2\sin^2\frac{\theta}{2} = 2k^2(1-\cos\theta) \tag{7.2.8}$$

であることに着目しよう. すると第1ボルン近似で, 湯川ポテンシャルによる

散乱の微分断面積は

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right) \simeq \left(\frac{2\,mV_0}{\mu\hbar^2}\right)^2 \frac{1}{[\,2\,k^2(1-\cos\theta)+\mu^2]^2} \qquad (7.2.9)$$

によって与えられる．

ここで面白いことに $\mu \to 0$ とする極限過程で V_0/μ を例えば $ZZ'e^2$ に固定しておくと，湯川ポテンシャルはクーロンポテンシャルに戻る．こうして得られる1次のボルン微分断面積は

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right) \simeq \frac{(2\,m)^2(ZZ'e^2)^2}{\hbar^4}\frac{1}{16k^4\sin^4(\theta/2)} \qquad (7.2.10)$$

であることが分かる．さらに $\hbar k$ を $|\boldsymbol{p}|$ と同じと見なすと $\hbar$ さえも消えて

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right) \simeq \frac{1}{16}\left(\frac{ZZ'e^2}{E_{KE}}\right)^2 \frac{1}{\sin^4(\theta/2)} \qquad (7.2.11)$$

となる．ここで $E_{KE} \equiv |\boldsymbol{p}|^2/2\,m$ である．これは正に，古典的に導くことのできるラザフォード散乱の断面積である．

球対称ポテンシャルのボルン振幅の式(7.2.4)に戻ろう．$f(\boldsymbol{k}', \boldsymbol{k})$を対応する1次のボルン振幅 $f^{(1)}$ で近似すると，いくつかの一般的注意を与えることができる．

1．$d\sigma/d\Omega$ あるいは $f(\theta)$ は，q だけの関数である．すなわち $f(\theta)$ はエネルギー $(\hbar^2k^2/2\,m)$ と θ に，$2\,k^2(1-\cos\theta)$ という組合せを通じてのみ依存する．

2．$f(\theta)$ は常に実数である．

3．$d\sigma/d\Omega$ は V の符号に依らない．

4．小さな k（必然的に小さな q）に対しては

$$f^{(1)}(\theta) = -\frac{1}{4\pi}\frac{2\,m}{\hbar^2}\int V(r)d^3x$$

であり，θ に依存しない体積積分が現れる．

5．大きな q に対しては，被積分関数が早く振動するので $f(\theta)$ は小さい．

ここで１次のボルン振幅の妥当性について議論しよう．ボルン近似が適用できるとすると，ポテンシャルの及ぶ範囲で——すなわち $V(\boldsymbol{x})$ がきく領域の内部で—— $\langle \boldsymbol{x}|\psi^{(+)}\rangle$ は $\langle \boldsymbol{x}|\phi\rangle$ とあまり違っていてはならない．これは近似を導いた式から明らかである．違っていれば，$|\psi^{(+)}\rangle$ を $|\phi\rangle$ で置き換えることは許されない．いいかえれば入射波のゆがみは小さくなくてはならない．厳密な表式(7.1.22)に戻ると，散乱ポテンシャルの中心附近 $\boldsymbol{x}\simeq 0$ で $\langle \boldsymbol{x}|\psi^{(+)}\rangle$ が $\langle \boldsymbol{x}|\phi\rangle$ とあまり異なっていない条件は

$$\left|\frac{2m}{\hbar^2}\frac{1}{4\pi}\int d^3x'\,\frac{e^{ikr'}}{r'}\,V(\boldsymbol{x}')\,e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}'}\right| \ll 1 \qquad (7.2.12)$$

であることが分かる．そこで特に(7.2.5)の湯川ポテンシャルの場合に，どうなるかを考察しよう．低エネルギーでは——すなわち小さい k $(k \ll \mu)$ に対しては —— $e^{ikr'}$ を１で置きかえてよい．すると

$$\frac{2m}{\hbar^2}\frac{|V_0|}{\mu^2} \ll 1 \qquad (7.2.13)$$

が得られる．この要請を，湯川ポテンシャルに対して束縛状態が現われる条件と比較してみよう．後者は負の V_0 に対して

$$\frac{2m}{\hbar^2\mu^2}|V_0| \geq 2.7 \qquad (7.2.14)$$

であることが示せる．いいかえれば，ポテンシャルが束縛状態を作るほど十分に強いとき，ボルン近似は間違った結果を与えるに違いない．逆に大きな k の極限では，(7.1.22) 式の第２項が小さい条件は

$$\frac{2m}{\hbar^2}\frac{|V_0|}{\mu k}\ln\left(\frac{k}{\mu}\right) \ll 1 \qquad (7.2.15)$$

を意味していることが示せる．この不等式は k が大きくなるほど容易に満足

される．ごく一般的に，ボルン近似はエネルギーが高いほどよい近似となる．

高次のボルン近似

次に高次のボルン近似を考察しよう．ここで記号を導入して用いると記述はずっと簡潔にできる．遷移演算子 T を

$$V|\psi^{(+)}\rangle = T|\phi\rangle \tag{7.2.16}$$

のように定義する†．リップマン-シュウィンガー方程式(7.1.6)に V をかけると

$$T|\phi\rangle = V|\phi\rangle + V\frac{1}{E-H_0+i\varepsilon}T|\phi\rangle \tag{7.2.17}$$

が得られる．この式は $|\phi\rangle$ が任意の平面波状態をとったとき成立すると仮定する．さらにこの運動量固有ケットは完全系を作ることが分かっている．したがって演算子 T は次の方程式を満足するに違いない：

$$T = V + V\frac{1}{E-H_0+i\varepsilon}T\ . \tag{7.2.18}$$

一方(7.1.34)の散乱振幅は［$|\phi\rangle$ に運動量固有ケットをとった(7.2.16)を用いて］

$$f(\boldsymbol{k}', \boldsymbol{k}) = -\frac{1}{4\pi}\frac{2m}{\hbar^2}(2\pi)^3\langle \boldsymbol{k}'|T|\boldsymbol{k}\rangle \tag{7.2.19}$$

のように表わすことができる．つまり $f(\boldsymbol{k}', \boldsymbol{k})$ を決めるには，遷移演算子 T が分かれば十分である．

T の逐次解は次のように得られる：

$$T = V + V\frac{1}{E-H_0+i\varepsilon}V + V\frac{1}{E-H_0+i\varepsilon}V\frac{1}{E-H_0+i\varepsilon}V + \cdots\cdots\ . \tag{7.2.20}$$

† 訳注：遷移演算子 T を T 行列ともいう．

これに対応してfを次のように展開することができる：

$$f(\boldsymbol{k}', \boldsymbol{k}) = \sum_{n=1}^{\infty} f^{(n)}(\boldsymbol{k}', \boldsymbol{k}) \tag{7.2.21}$$

ここでnはV演算子が現われる回数であるから

$$f^{(1)}(\boldsymbol{k}', \boldsymbol{k}) = -\frac{1}{4\pi}\frac{2m}{\hbar^2}(2\pi)^3 < \boldsymbol{k}' | V | \boldsymbol{k} >$$

$$f^{(2)}(\boldsymbol{k}', \boldsymbol{k}) = -\frac{1}{4\pi}\frac{2m}{\hbar^2}(2\pi)^3 < \boldsymbol{k}' \left| V \frac{1}{E-H_0+i\varepsilon} V \right| \boldsymbol{k} > \tag{7.2.22}$$

$$\vdots$$

が成り立つ．$f^{(2)}$に対する具体的な形が要求されるとき，これを

$$f^{(2)} = -\frac{1}{4\pi}\frac{2m}{\hbar^2}(2\pi)^3 \int d^3x' \int d^3x'' < \boldsymbol{k}' | \boldsymbol{x}' > V(\boldsymbol{x}')$$

$$\times < \boldsymbol{x}' \left| \frac{1}{E-H_0+i\varepsilon} \right| \boldsymbol{x}'' > V(\boldsymbol{x}'') < \boldsymbol{x}'' | \boldsymbol{k} >$$

$$= -\frac{1}{4\pi}\frac{2m}{\hbar^2} \int d^3x' \int d^3x'' e^{-i\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{x}'} V(\boldsymbol{x}')$$

$$\times \left[\frac{2m}{\hbar^2} G_+(\boldsymbol{x}', \boldsymbol{x}'') \right] V(\boldsymbol{x}'') e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}''} \tag{7.2.23}$$

と書くことができる．(7.2.23)式の物理的解釈が，図7.4に与えられている．この図で入射波はx''で相互作用し——$V(\boldsymbol{x}'')$が現われることを示す——次に$\boldsymbol{x}''$から$\boldsymbol{x}'$までヘルムホルツ方程式(7.1.18)を満たすグリーン関数を通じて伝播する．続いて$\boldsymbol{x}'$で第2の相互作用が働き——そこで$V(\boldsymbol{x}')$が現われ——最後にその波は$\boldsymbol{k}'$の方向に散乱される．言葉をかえれば，$f^{(2)}$は2段階過程と見ることのできる散乱に対応する．同じように$f^{(3)}$は3段階過程と見ることができ，以下同様である．

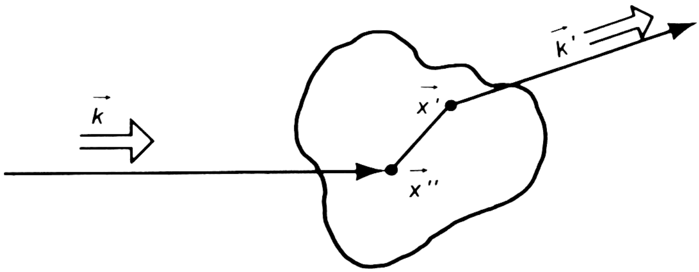


図 7.4. 高次のボルン項 $f^{(2)}(\boldsymbol{k}', \boldsymbol{k})$ の物理的解釈.

7.3 光学定理

ボーア，パイエルスおよびプラチェクが見い出した，**光学定理**という名の非常に有名な関係式がある．これは前方散乱振幅 $f(\theta = 0)$ の虚数部分を，全断面積 σ_{tot} と次のように関連づける：

光学定理

$$\mathrm{Im} f(\theta = 0) = \frac{k\sigma_{\text{tot}}}{4\pi} . \tag{7.3.1}$$

ここで

$$f(\theta = 0) \equiv f(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{k}) \tag{7.3.2}$$

であり，$\boldsymbol{k}' \equiv \boldsymbol{k}$ と置いたことは散乱が前方であることを示している．また

$$\sigma_{\text{tot}} \equiv \int \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega \tag{7.3.3}$$

である.

証明 (7.2.19)式より

$$f(\theta = 0) = f(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{k}) = -\frac{1}{4\pi}\frac{2m}{\hbar^2}(2\pi)^3 < \boldsymbol{k}|T|\boldsymbol{k}> \tag{7.3.4}$$

が成り立つ．次に $\mathrm{Im}\langle \boldsymbol{k}|T|\boldsymbol{k}\rangle$ を(7.2.16)，(7.1.6)および V のエルミート性を用いて計算する：

$$\mathrm{Im}\langle \boldsymbol{k}|T|\boldsymbol{k}\rangle = \mathrm{Im}\langle \boldsymbol{k}|V|\psi^{(+)}\rangle$$

$$= \mathrm{Im}\left[\left(\langle\psi^{(+)}| - \langle\psi^{(+)}|\ V\frac{1}{E-H_0-i\varepsilon}\right)V|\psi^{(+)}\rangle\right]. \tag{7.3.5}$$

ここでよく知られた関係式

$$\frac{1}{E-H_0-i\varepsilon} = \mathrm{Pr.}\left(\frac{1}{E-H_0}\right) + i\pi\delta(E-H_0)$$

を用い(7.3.5)の右辺を

$$\mathrm{Im}(\langle\psi^{(+)}|V|\psi^{(+)}\rangle) - \mathrm{Im}\langle\psi^{(+)}|V\mathrm{Pr.}\frac{1}{E-H_0}V|\psi^{+}\rangle$$

$$-\mathrm{Im}\langle\psi^{(+)}|Vi\pi\delta(E-H_0)V|\psi^{(+)}\rangle \tag{7.3.6}$$

の形に書きかえる．(7.3.6)式のはじめの2項は，V と $V\mathrm{Pr.}\{[1/(E-H_0)]V\}$ のエルミート性からゼロである．したがって(7.3.6)は

$$-\pi\langle\psi^{(+)}V|\delta(E-H_0)V|\psi^{(+)}\rangle \tag{7.3.7}$$

となる．さらにまた(7.3.7)を(7.2.16)と $|\phi\rangle = |\boldsymbol{k}\rangle$ を用いて書き直すと

$$\mathrm{Im}\langle \boldsymbol{k}|T|\boldsymbol{k}\rangle = -\pi\langle \boldsymbol{k}|T^{\dagger}\delta(E-H_0)T|\boldsymbol{k}\rangle$$

$$= -\pi\int d^3k'\langle \boldsymbol{k}|T^{\dagger}|\boldsymbol{k}'\rangle\langle \boldsymbol{k}'|T|\boldsymbol{k}\rangle\delta\left(E-\frac{\hbar^2k'^2}{2m}\right)$$

$$= -\pi\int d\Omega'\frac{mk}{\hbar^2}|\langle \boldsymbol{k}'|T|\boldsymbol{k}\rangle|^2 \tag{7.3.8}$$

が得られる．ここで $d^3k' = k'^2dE(dk'/dE)d\Omega'$ と δ-関数による制限 $E=$

$\hbar^2 k'^2/2m$ [それゆえ $dE = (\hbar^2 k'/m)dk'$] および——最後に—— $k' = k$ を用いた. (7.3.4)式と(7.3.8)式から

$$\mathrm{Im} f(0) = -\frac{1}{4\pi}\frac{2m}{\hbar^2}(2\pi)^3\left(-\frac{\pi mk}{\hbar^2}\int d\Omega' |\langle \boldsymbol{k}'|T|\boldsymbol{k}\rangle|^2\right)$$

$$= \frac{k}{4\pi}\sigma_{\mathrm{tot}} \tag{7.3.9}$$

が得られる. この式の導出の最後の段階では, (7.1.36), (7.2.19)および(7.3.3)を用いた. □

光学定理の物理的意味を吟味するのは, 影散乱 (shadow scattering, 回折散乱ともいう) を議論してからにしよう.

7.4 アイコナール近似

この近似が適用されるのは, 波長 λ (これは"小さい"とみなされる) の程度の距離で, $V(\boldsymbol{x})$ がごくわずかしか変化しない場合である. V そのものは, $E \gg |V|$ である限り弱い必要がないことに注意しよう. したがってこれが用いられる範囲は, ボルン近似と異なっている. このような条件下では半古典的な経路の概念が適用でき, 厳密な波動関数 $\psi^{(+)}$ を半古典的波動関数 [(2.4.18)と(2.4.22)を見よ], すなわち

$$\psi^{(+)} \sim e^{iS(\boldsymbol{x})/\hbar} \tag{7.4.1}$$

で置きかえる. 2.4節で議論したように, こうすると S に対するハミルトン・ヤコビの方程式

$$\frac{(\nabla S)^2}{2m} + V = E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \tag{7.4.2}$$

が導かれる. (7.4.2)から S を計算するのにさらに近似をして, 古典的軌跡が

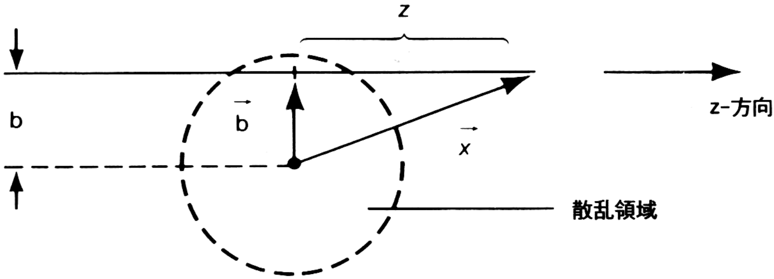


図 7.5. 散乱のアイコナール近似の概念図．古典論の直線的軌跡は z-方向に沿っていて $|\boldsymbol{x}|=r$ である．$b=|\boldsymbol{b}|$ は衝突径数．

直線的経路であるとしよう．これは高エネルギーで軌道の偏向が少ないときに満足される近似である*．直線的な軌跡を z-方向にとり，図7.5に示されるような場合を考察する．(7.4.2)式を積分すると

$$\frac{S}{\hbar}=\int_{-\infty}^{z}\left[k^2-\frac{2m}{\hbar^2}V(\sqrt{b^2+z'^2})\right]^{1/2}dz'+\text{定数} \qquad (7.4.3)$$

となる．付加定数は

$$\frac{S}{\hbar}\to kz \quad , \qquad V\to 0\text{のとき} \qquad (7.4.4)$$

となるように選ぶ．つまりポテンシャルがゼロになる極限で，(7.4.1)が平面波の形になるようにしておく．すると等式(7.4.3)は

$$\frac{S}{\hbar}=kz+\int_{-\infty}^{z}\left[\sqrt{k^2-\frac{2m}{\hbar^2}V(\sqrt{b^2+z'^2})}-k\right]dz'$$

$$\simeq kz-\frac{m}{\hbar^2 k}\int_{-\infty}^{z}V(\sqrt{b^2+z'^2})dz' \qquad (7.4.5)$$

と書ける．ここで $E=\hbar^2k^2/2m$ が大きいとき，$E\gg V$ に対して

* いうまでもないことだが，一般に(7.4.2)を解いて古典的軌跡を決定することは極めて難かしい．

$$\sqrt{k^2-\frac{2m}{\hbar^2}V(\sqrt{b^2+z'^2})}\sim k-\frac{mV}{\hbar^2 k}$$

を用いている．以上により

$$\psi^{(+)}(\boldsymbol{x})=\psi^{(+)}(\boldsymbol{b}+z\hat{\boldsymbol{z}})\simeq\frac{1}{(2\pi)^{3/2}}e^{ikz}\exp\left[\frac{-im}{\hbar^2 k}\int_{-\infty}^{z}V(\sqrt{b^2+z'^2})\,dz'\right] \quad (7.4.6)$$

となる．(7.4.6)式は入射波プラス外向き球面波という形の正確な漸近形をしていないが（すなわち $e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}+f(\theta)(e^{ikr}/r)$ の形でなく，入射方向に沿った運動のみを表わしているが），それにも拘らずこれを(7.1.34)式中で用いると $f(\boldsymbol{k}',\boldsymbol{k})$ の近似的表式が得られる．すなわち

$$f(\boldsymbol{k}',\boldsymbol{k})=-\frac{1}{4\pi}\frac{2m}{\hbar^2}\int d^3x'\,e^{-i\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{x}'}\,V(\sqrt{b^2+z'^2})e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}'}$$

$$\times\exp\left[-\frac{im}{\hbar^2 k}\int_{-\infty}^{z'}V(\sqrt{b^2+z''^2})dz''\right] \quad (7.4.7)$$

が得られる．この最後の因子 exp[……] を除くと，(7.4.7)はちょうど(7.2.2)の1次のボルン振幅と同じであることに注目しよう．(7.4.7)式の3次元 (d^3x') 積分を，円柱座標 $d^3x'=bdbd\phi_b dz'$ を導入し（図7.5参照），また

$$(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')\cdot\boldsymbol{x}'=(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')\cdot(\boldsymbol{b}+z'\hat{\boldsymbol{z}})\simeq-\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{b} \quad (7.4.8)$$

に注意して実行する．この式で $\boldsymbol{k}\perp\boldsymbol{b}$ および $(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')\cdot\hat{\boldsymbol{z}}\sim 0(\theta^2)$ を用いた．後者は偏向角 θ が小さいとき無視できる．散乱が xz-面内で行われるとして

$$\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{b}=(k\sin\theta\,\hat{\boldsymbol{x}}+k\cos\theta\,\hat{\boldsymbol{z}})\cdot(b\cos\phi_b\,\hat{\boldsymbol{x}}+b\sin\phi_b\,\hat{\boldsymbol{y}})$$

$$\simeq kb\theta\cos\phi_b \quad (7.4.9)$$

と書いても一般性は失われない．$f(\boldsymbol{k}',\boldsymbol{k})$ に対する表式は

$$f(\boldsymbol{k}',\boldsymbol{k})=-\frac{1}{4\pi}\frac{2m}{\hbar^2}\int_0^{\infty}bdb\int_0^{2\pi}d\phi_b\,e^{-ikb\theta\cos\phi_b}$$

$$\times \int_{-\infty}^{+\infty} dz\ V \exp\left[\frac{-im}{\hbar^2 k}\int_{-\infty}^{z} Vdz'\right] \tag{7.4.10}$$

となる．ここで次の恒等式を用いる：

$$\int_0^{2\pi} d\phi_b\, e^{-ikb\theta\cos\phi_b} = 2\,\pi\, J_0(kb\theta) \tag{7.4.11}$$

および

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dz V \exp\left[\frac{-im}{\hbar^2 k}\int_{-\infty}^{z} Vdz'\right] = \frac{i\hbar^2 k}{m}\exp\left[\frac{-im}{\hbar^2 k}\int_{-\infty}^{z} Vdz'\right]\Bigg|_{z=-\infty}^{z=+\infty} \tag{7.4.12}$$

(7.4.12)式右辺で $z = -\infty$ からの寄与は，もちろん消える．したがって最終的に

$$f(\boldsymbol{k}', \boldsymbol{k}) = -ik\int_0^{\infty} dbJ_0(kb\theta)\left[e^{2i\Delta(b)} - 1\right], \tag{7.4.13}$$

$$\Delta(b) \equiv \frac{-m}{2k\hbar^2}\int_{-\infty}^{+\infty} V(\sqrt{b^2+z^2})dz \tag{7.4.14}$$

が得られる．(7.4.14)式中では衝突径数 b を固定し，図7.5に示すように直線に沿って z の積分を行う．(7.4.13)式中の $[e^{2i\Delta(b)}-1]$ からの寄与は，b が V の及ぶ範囲より大きくなると，なくなる．

このアイコナール近似が光学定理(7.3.1)を満たすことは，簡単に示せる．この証明およびいくつかの興味ある応用——例えば V がガウス型ポテンシャルであるとき，$\Delta(b)$ は b 空間でガウス型になること——などは，他の本（Gottfried, 1966）で議論されている．V が湯川ポテンシャルである場合については，この章末の問題を参照して欲しい．

7.5　自由粒子状態：平面波と球面波

球対称ポテンシャルによる散乱を考察する際に，ある決まった角運動量を持つ状態が散乱体によってどのように影響されるかを，調べることが多い．このような考察から，7.6節で詳しく議論することになる部分波の方法が導かれる．しかし，散乱状態の角運動量分解を議論する前に，まず自由粒子状態の話をしよう．この状態は角運動量の固有状態でもある．

自由粒子のハミルトニアンは単に運動エネルギー演算子であり，これは明らかに運動量演算子と交換する．このため7.1節では自由粒子ハミルトニアンの固有ケット $|\phi\rangle$ を，運動量固有ケットすなわち平面波状態 $|\mathbf{k}\rangle$ にとった．この運動量演算子の固有値は $\hbar\mathbf{k}$ である．しかし自由粒子ハミルトニアンは，$\mathbf{L}^2$ および L_z ともまた交換する．そこで H_0，$\mathbf{L}^2$ および L_z の同時固有ケットを考えることが可能である．スピンを無視すると，このような状態は $|E,\ l,\ m\rangle$ と記され，しばしば**球面波状態**と呼ばれる．

さらに一般的に述べると，最も一般的な自由粒子状態はいろいろな $E,\ l,\ m$ に関して $|E,\ l,\ m\rangle$ を重ね合せた状態と見なすことができる．これはちょうど最も一般的な自由粒子状態が，大きさも方向も異なった $\mathbf{k}$ に関して $|\mathbf{k}\rangle$ を重ね合せた状態と見なすことができることと同様である．いいかえれば自由粒子状態を解析するのに平面波の基底 $\{|\mathbf{k}\rangle\}$ を用いることもできるし，また球面波の基底 $\{|E,\ l,\ m\rangle\}$ を用いることもできる．

ここで平面波の基底と球面波の基底を関連づける変換関数 $\langle\mathbf{k}|E,\ l,\ m\rangle$ を導出しよう．この量は，$E,\ l,\ m$ で特徴づけられる球面波の，運動量空間での波動関数と見なすこともできる．球面波固有ケットの規格化は

$$\langle E',\ l',\ m'|E,\ l,\ m\rangle=\delta_{ll'}\delta_{mm'}\delta(E-E') \qquad (7.5.1)$$

とすることにしよう．

位置空間の波動関数との類推から［訳注：(3.6.22)参照]，角度依存

性は

$$<\boldsymbol{k}|E,\ l,\ m> = g_{lE}(k)Y_l^m(\hat{\boldsymbol{k}}) \tag{7.5.2}$$

のようであろう．これを厳密に証明するのには，次のようにする．まず運動量固有ケット $|k\hat{\boldsymbol{z}}>$ を考える．すなわち z-軸の正方向に進んでいく平面波状態である．この状態の重要な性質の一つは，軌道角運動量の z-方向成分がないことである：

$$L_z|k\hat{\boldsymbol{z}}> = (xp_y - yp_x)|k_x = 0,\ k_y = 0,\ k_z = k> = 0\ . \tag{7.5.3}$$

実際これは古典的考察によっても正しいと思える：$\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{p} = (\boldsymbol{x}\times\boldsymbol{p})\cdot\boldsymbol{p} = 0$ であるから角運動量の進行方向成分はゼロでなければならない．(7.5.3)により，$m' \neq 0$ に対しては $<E',\ l',\ m'|k\hat{\boldsymbol{z}}> = 0$ となるから，$|k\hat{\boldsymbol{z}}>$ を次のように展開できるに違いない：

$$|k\hat{\boldsymbol{z}}> = \sum_{l'}\int dE'|E',\ l',\ m' = 0><E',\ l',\ m' = 0|k\hat{\boldsymbol{z}}>. \tag{7.5.4}$$

ここで m' の和はないことに注意する：m' は常にゼロなのである．ごく一般的な運動量固有ケットで $\boldsymbol{k}$ の方向が θ と ϕ で指定されるものを得るには，次のように適切な回転演算子を $|k\hat{\boldsymbol{z}}>$ にかけてやればよい［図3.3および(3.6.47)を参照］：

$$|\boldsymbol{k}> = \mathscr{D}(\alpha = \phi,\ \beta = \theta,\ \gamma = 0)|k\hat{\boldsymbol{z}}>\ . \tag{7.5.5}$$

この式に左から $<E,\ l,\ m|$ をかけると

$$\begin{aligned}<E,\ l,\ m|\boldsymbol{k}> &= \sum_{l'}\int dE'<E,\ l,\ m|\mathscr{D}(\alpha=\phi,\ \beta=\theta,\ \gamma=0)|E',\ l',\ m' = 0>\\ &\quad\times<E',\ l',\ m' = 0|k\hat{\boldsymbol{z}}>\\ &= \sum_{l'}\int dE'\mathscr{D}_{m0}^{(l')}(\alpha = \phi,\ \beta = \theta,\ \gamma = 0)\,\delta_{ll'}\,\delta(E - E')\\ &\quad\times<E',\ l',\ m' = 0|k\hat{\boldsymbol{z}}>\end{aligned}$$

$$= \mathscr{D}_{m0}^{(l)}(\alpha = \phi,\ \beta = \theta,\ \gamma = 0)<E,\ l,\ m = 0|k\hat{\boldsymbol{z}}> \tag{7.5.6}$$

となる．ところで $<E, l, m=0\,|\,k\hat{z}>$ は $\boldsymbol{k}$ の方向——すなわち θ と ϕ——に依存していないので，これを $\sqrt{\dfrac{2l+1}{4\pi}}\,g^{*}_{lE}(k)$ と置いてよいであろう．したがって(3.6.51)を用いると

$$<\boldsymbol{k}\,|\,E, l, m> = g_{lE}(k)\,Y_l^m(\hat{\boldsymbol{k}}) \qquad (7.5.7)$$

と書くことができる．

次に $g_{lE}(k)$ を決めよう．まず

$$(H_0 - E)\,|\,E, l, m> = 0 \qquad (7.5.8)$$

に注目する．一方 H_0-E を運動量固有ブラ $<\boldsymbol{k}|$ にかけると

$$<\boldsymbol{k}\,|(H_0 - E) = \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E\right)<\boldsymbol{k}\,| \qquad (7.5.9)$$

である．(7.5.9)に右から $|E,\ l,\ m>$ をかけると

$$\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E\right) < \boldsymbol{k}\,|\,E, l, m> = 0 \qquad (7.5.10)$$

が得られる．これは，$<\boldsymbol{k}\,|\,E, l, m>$ がゼロでないのは $E = \hbar^2k^2/2m$ のときのみであることを意味している．したがって $g_{lE}(k)$ を

$$g_{lE}(k) = N\delta\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E\right) \qquad (7.5.11)$$

と表わすことができるに違いない．この N を決めるには(7.5.1)の規格化の約束に戻る．すると

$$<E', l', m'\,|\,E, l, m> = \int d^3k'' <E', l', m'\,|\,\boldsymbol{k}''> <\boldsymbol{k}''\,|\,E, l, m>$$

$$= \int k''^2 dk'' \int d\Omega_{k''}\,|N|^2\delta\left(\frac{\hbar^2 k''^2}{2m} - E'\right)$$

$$\times\ \delta\left(\frac{\hbar^2 k''^2}{2m}-E\right) Y_{l'}^{m'*}(\hat{\boldsymbol{k}}'') Y_l^m(\hat{\boldsymbol{k}}'')$$

$$=\int \frac{k''^2 dE''}{dE''/dk''}\int d\Omega_{k''}|N|^2\delta\left(\frac{\hbar^2 k''^2}{2m}-E'\right)\delta\left(\frac{\hbar^2 k''^2}{2m}-E\right)$$

$$\times\ Y_l^{m'*}(\hat{\boldsymbol{k}}'') Y_l^m(\hat{\boldsymbol{k}}'')$$

$$=|N|^2\frac{mk'}{\hbar^2}\delta(E-E')\delta_{ll'}\delta_{mm'} \tag{7.5.12}$$

が得られる．ここでは $E''=\hbar^2 k''^2/2m$ と定義し，k''-積分を E''-積分に変更した．この式を(7.5.1)と比較すると $N=\hbar/\sqrt{mk}$ にとればよいことが分かる．したがって結局

$$g_{lE}(k)=\frac{\hbar}{\sqrt{mk}}\delta\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m}-E\right) \tag{7.5.13}$$

と書けて

$$<\boldsymbol{k}|E,\ l,\ m>=\frac{\hbar}{\sqrt{mk}}\delta\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m}-E\right) Y_l^m(\hat{\boldsymbol{k}}) \tag{7.5.14}$$

が得られる．(7.5.14)を用いて，平面波状態 $|\boldsymbol{k}>$ が自由球面波状態のすべての可能な l の値に関する重ね合せとして表わされることが分かる．すなわち

$$|\boldsymbol{k}>=\sum_l\sum_m\int dE|E,\ l,\ m><E,\ l,\ m|\boldsymbol{k}>$$

$$=\sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l}|E,\ l,\ m>|_{E=\hbar^2k^2/2m}\left(\frac{\hbar}{\sqrt{mk}}\ Y_l^{m*}(\hat{\boldsymbol{k}})\right) \tag{7.5.15}$$

である．平面波の横方向の拡がりは無限大なので，平面波にはすべての可能な衝突径数 b（半古典的には衝突径数 $b\simeq l\hbar/p$）が含まれるに違いない．こうして見ると運動量固有状態 $|\boldsymbol{k}>$ を球面波状態を用いて解析したとき，すべて

の可能な l の値が含まれるのは驚くべきことではない．

以上 $|E, l, m\rangle$ に対する運動量空間の波動関数を導出した．次に位置座標空間で対応する波動関数を考えよう．読者は波動力学を学んで，自由な球面波の波動関数が $j_l(kr)Y_l^m(\hat{r})$ であることをよく知っているであろう．ここで $j_l(kr)$ は l 次の球ベッセル関数である（付録 A を参照）．第 2 の解 $n_l(kr)$ も該当する微分方程式を満足するが，原点で特異的なので許されない．そこで

$$\langle \boldsymbol{x}|E, l, m\rangle = c_l\, j_l(kr) Y_l^m(\hat{\boldsymbol{r}}) \tag{7.5.16}$$

と書くことができる．係数 c_l を決めるには

$$\langle \boldsymbol{x}|\boldsymbol{k}\rangle = \frac{e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}}{(2\pi)^{3/2}} = \sum_l\sum_m \int dE \langle \boldsymbol{x}|E, l, m\rangle \langle E, l, m|\boldsymbol{k}\rangle$$

$$= \sum_l\sum_m \int dE\, c_l\, j_l(kr) Y_l^m(\hat{\boldsymbol{r}}) \frac{\hbar}{\sqrt{mk}} \delta\left(E - \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\right) Y_l^{m*}(\hat{\boldsymbol{k}})$$

$$= \sum_l \frac{2l+1}{4\pi} P_l(\hat{\boldsymbol{k}}\cdot\hat{\boldsymbol{r}}) \frac{\hbar}{\sqrt{mk}} c_l\, j_l(kr) \tag{7.5.17}$$

を下の式(7.5.18)と比較すればよい．ここで加法定理

$$\sum_m Y_l^m(\hat{\boldsymbol{r}}) Y_l^{m*}(\hat{\boldsymbol{k}}) = [(2l+1)/4\pi] P_l(\hat{\boldsymbol{k}}\cdot\hat{\boldsymbol{r}})$$

を最後の段階で用いた．一方 $\langle \boldsymbol{x}|\boldsymbol{k}\rangle = e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}/(2\pi)^{3/2}$ は

$$\frac{e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}}{(2\pi)^{3/2}} = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \sum_l (2l+1) i^l j_l(kr) P_l(\hat{\boldsymbol{k}}\cdot\hat{\boldsymbol{r}}) \tag{7.5.18}$$

のように表わすこともできる．この式は $j_l(kr)$ に対する次の積分表示を用いて証明することができる：

$$j_l(kr) = \frac{1}{2i^l}\int_{-1}^{1} e^{ikr\cos\theta} P_l(\cos\theta) d(\cos\theta)\ . \tag{7.5.19}$$

(7.5.17)と(7.5.18)の両式を比較して

$$c_l = \frac{i^l}{\hbar}\sqrt{\frac{2mk}{\pi}} \tag{7.5.20}$$

が求まる．要約すると

$$\langle \boldsymbol{k} | E, l, m \rangle = \frac{\hbar}{\sqrt{mk}}\,\delta\!\left(E - \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\right) Y_l^m(\hat{\boldsymbol{k}}) \tag{7.5.21a}$$

$$\langle \boldsymbol{x} | E, l, m \rangle = \frac{i^l}{\hbar}\sqrt{\frac{2mk}{\pi}}\, j_l(kr)\, Y_l^m(\hat{\boldsymbol{r}}) \tag{7.5.21b}$$

である．これらの表式は，次節で議論する部分波展開を実行する際に，非常に有用である．

この節の最後に，(7.5.21a)を崩壊過程に応用してみよう．スピン j の母粒子が2個のスピン・ゼロの粒子に分解すると仮定しよう．A(スピン j) → B(スピン0)＋C(スピン0)とする．このような崩壊過程を記述するハミルトニアンは，一般に非常に複雑である．しかしこのハミルトニアンは回転不変であるに違いないから，角運動量が保存することが分かる．したがって終状態の運動量空間の波動関数は，l を母粒子のスピンとして(7.5.21a)の形をしているに違いない．運動量空間の波動関数は，相対運動量 $\boldsymbol{k}$ の方向に崩壊生成粒子を見出す確率振幅に他ならないから，これより直ちに崩壊生成粒子の角度分布を計算することができる．

具体的な例を核物理学からとり，励起原子核 Ne^{20*} ［訳註：スピン1を持つ］

$$Ne^{20*} \to O^{16} + He^4 \tag{7.5.22}$$

を考察しよう．O^{16} も He^4 もスピンを持たない粒子である．母核の磁気量子数が，ある方向 z に対して ±1 であるとする．このとき崩壊生成粒子の角度分

布は，(θ, ϕ) を崩壊生成粒子の相対的方向 $\boldsymbol{k}$ を決める極座標の角度として，$|Y_1^{\pm 1}(\theta, \phi)|^2 = (3/8\pi)\sin^2\theta$ に比例する．一方スピン1の母核の磁気量子数がゼロであると，崩壊角度分布は $|Y_1^0(\theta, \phi)|^2 = (3/4\pi)\cos^2\theta$ のように変化する．

一般のスピン方向に対しては

$$\sum_{m=-1}^{1} w(m)|Y_{l=1}^{m}|^2 \tag{7.5.23}$$

が得られる．分極していない核では各々の $w(m)$ がすべて平等なので，等方的分布が得られる．母粒子が分極していないときは優位となる方向がないので，これは当然である．

スピンが大きい粒子では崩壊の角度分布がもっとこみ入っている．崩壊する母系のスピンが大きくなればなるほど，崩壊生成粒子の角度分布は複雑になってくる．ごく一般的に崩壊生成粒子の角度分布を調べることによって，母核のスピンを決定することが可能である．

7.6 部分波の方法

部分波展開

$V \neq 0$ の場合に戻ろう．ポテンシャルが球対称で3次元回転に関して不変であると仮定する．このとき(7.2.20)で与えられる遷移演算子 T は，$\boldsymbol{L}^2$ および $\boldsymbol{L}$ と交換する．いいかえれば T はスカラー演算子である．

ここで球面波基底を用いるのが便利である．ウィグナー・エッカルトの定理をスカラー演算子に適用すると［(3.10.38)を見よ］，直ちに

$$\langle E', l', m'|T|E, l, m\rangle = T_l(E)\delta_{ll'}\,\delta_{mm'} \tag{7.6.1}$$

が得られる．すなわち，T は l についても m についても対角的である．さら

に（ゼロでない）対角要素は E と l に依存するが m には依らない．すぐ分かるようにこれは計算を非常に簡単にする．

ここで散乱振幅(7.2.19)を調べよう：

$$f(\boldsymbol{k}', \boldsymbol{k}) = -\frac{1}{4\pi}\frac{2m}{\hbar^2}(2\pi)^3 < \boldsymbol{k}'|T|\boldsymbol{k}>$$

$$= -\frac{1}{4\pi}\frac{2m}{\hbar^2}(2\pi)^3\sum_l\sum_m\sum_{l'}\sum_{m'}\int dE\int dE' <\boldsymbol{k}'|E', l', m'>$$

$$\times <E', l', m'|T|E, l, m> <E, l, m|\boldsymbol{k}>$$

$$= -\frac{1}{4\pi}\frac{2m}{\hbar^2}(2\pi)^3\frac{\hbar^2}{mk}\sum_l\sum_m T_l(E)\Big|_{E=\hbar^2k^2/2m} Y_l^m(\hat{\boldsymbol{k}}')\,Y_l^{m*}(\hat{\boldsymbol{k}})$$

$$= -\frac{4\pi^2}{k}\sum_l\sum_m T_l(E)\Big|_{E=\hbar^2k^2/2m} Y_l^m(\hat{\boldsymbol{k}}')Y_l^{m*}(\hat{\boldsymbol{k}})\ . \qquad (7.6.2)$$

散乱振幅の角度依存性を求めるために，いつものように $\boldsymbol{k}$ が z-軸の正方向を向くように座標系を選ぼう．すると $P_l(1) = 1$ より［(3.6.50)参照］

$$Y_l^m(\hat{\boldsymbol{k}}) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}\,\delta_{m0} \qquad (7.6.3)$$

となり $m = 0$ の項だけが寄与する．$\boldsymbol{k}'$ と $\boldsymbol{k}$ の間の角度を θ とすると

$$Y_l^0(\hat{\boldsymbol{k}}') = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}\,P_l(\cos\theta) \qquad (7.6.4)$$

と書ける．ここで慣習に従い**部分波振幅** $f_l(k)$ を

$$f_l(k) \equiv -\frac{\pi T_l(E)}{k} \qquad (7.6.5)$$

のように定義しよう．すると(7.6.2)は

$$f(\boldsymbol{k}', \boldsymbol{k}) = f(\theta) = \sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)f_l(k)\,P_l(\cos\theta) \qquad (7.6.6)$$

となる．この $f(\theta)$ には，k が記されていないが，依然として k（すなわち入射エネルギー）に依存している．

$f_l(k)$ の物理的意味を吟味するために，(7.1.33)で与えられる波動関数 $\langle \boldsymbol{x}|\psi^{(+)}\rangle$ の遠方でのふるまいを調べよう．平面波の球面波による展開(7.5.18)を用い，次式

$$
j_l(kr) \xrightarrow{\text{大きな } r} \frac{e^{i(kr-l\pi/2)} - e^{-i(kr-l\pi/2)}}{2ikr}, \qquad (i^l = e^{i(\pi/2)l}) \tag{7.6.7}
$$

に着目し（付録A），さらに $f(\theta)$ が(7.6.6)で与えられることに注意すると

$$
\begin{aligned}
\langle \boldsymbol{x}|\psi^{(+)}\rangle &\xrightarrow{\text{大きな } r} \frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\left[e^{ikz} + f(\theta)\frac{e^{ikr}}{r}\right] \\
&= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\left[\sum_l (2l+1) P_l(\cos\theta)\left(\frac{e^{ikr} - e^{-i(kr-l\pi)}}{2ikr}\right)\right. \\
&\quad \left. + \sum_l (2l+1) f_l(k) P_l(\cos\theta)\frac{e^{ikr}}{r}\right] \\
&= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\sum_l (2l+1)\frac{P_l(\cos\theta)}{2ik}\left[[1 + 2ikf_l(k)]\frac{e^{ikr}}{r} - \frac{e^{-i(kr-l\pi)}}{r}\right]
\end{aligned} \tag{7.6.8}
$$

が得られる．散乱の物理的内容がこの式から明らかである．散乱体が存在しないとき，平面波は e^{ikr}/r の形の球対称な外向波と，それぞれの l に対して $-e^{-i(kr-l\pi)}/r$ の形の球対称な内向波の和として分解できる．散乱体が存在すると外向波の係数のみが

$$
1 \rightarrow 1 + 2ikf_l(k) \tag{7.6.9}
$$

のように変化する．内向波は全く影響を受けない．

ユニタリー性と位相のずれ

次に，確率の保存すなわちユニタリー性のもたらす帰結を検討しよう．時間に依らない式をたてたとき，流束密度 $\boldsymbol{j}$ は

$$\nabla \cdot \boldsymbol{j} = -\frac{\partial|\psi|^2}{\partial t} = 0 \qquad (7.6.10)$$

を満たさなくてはならない．ここで非常に大きい半径の球面を考えると，ガウスの定理により

$$\int_{\text{球面}} \boldsymbol{j} \cdot d\boldsymbol{S} = 0 \qquad (7.6.11)$$

が必ず成立する．物理的にいうと(7.6.10)と(7.6.11)は，粒子の湧き出しや吸い込みが存在しないことを意味している．外向きの流束は内向きの流束と等しくなければならない．さらに角運動量の保存則のために，この規則は各々の部分波に関し別々に成立しなければならない．いいかえれば，e^{ikr}/r の係数は e^{-ikr}/r の係数と大きさが同じでなければならない．$S_l(k)$ を

$$S_l(k) \equiv 1 + 2ikf_l(k) \qquad (7.6.12)$$

のように定義すると，これは［(7.6.9)より］

$$|S_l(k)| = 1 \qquad (7.6.13)$$

を意味する．すなわち起こりうることは，たかだか外向波の位相の変化である．等式(7.6.13)は l 番目の部分波に対する**ユニタリー関係式**と呼ばれている．散乱のもう少し進んだ扱いでは，$S_l(k)$ は S 演算子の l 番目の対角要素と見ることができる．これがユニタリー的であることは，確率の保存から要請される．

このようにして散乱の結果，遠く離れたところでの波動関数の変化は，外向波の位相の変化だけであることが分かった．この位相を $2\delta_l$ と置くと（因子2は慣習上のものである），δ_l を実数として

$$S_l = e^{2i\delta_l} \tag{7.6.14}$$

と書くことができる．ここで δ_l は $\delta_l(k)$ とあからさまに書かれていないが，k の関数であると解釈しなければならない．f_l に戻ると［(7.6.12)から］

$$f_l = \frac{S_l - 1}{2\,ik} \tag{7.6.15}$$

と，あるいは δ_l を用いて具体的に

$$f_l = \frac{e^{2i\delta_l} - 1}{2\,ik} = \frac{e^{i\delta_l}\sin\delta_l}{k} = \frac{1}{k\cot\delta_l - ik} \tag{7.6.16}$$

と表わすことができる．どちらにせよ便利な表式を用いるのがよい．全散乱振幅に対しては，δ_l を実数として

$$\begin{aligned} f(\theta) &= \sum_{l=0}(2\,l+1)\left(\frac{e^{2i\delta_l} - 1}{2\,ik}\right)P_l(\cos\theta) \\ &= \frac{1}{k}\sum_{l=0}(2\,l+1)\,e^{i\delta_l}\sin\delta_l\,P_l(\cos\theta) \end{aligned} \tag{7.6.17}$$

が成り立つ．$f(\theta)$ に対するこの表式は，**回転に対する不変性**と**確率の保存**という二つの原理によって導かれた．波動力学の多くの教科書では，実数値の球対称ポテンシャルを持つシュレーディンガー方程式を具体的に解いて，(7.6.17)を得ている．我々の(7.6.17)の導出法は，ポテンシャルが非相対論的量子力学の枠組で記述できない場合にも一般に通用するので興味深い．

微分断面積 $d\sigma/d\Omega$ は，(7.6.17)の絶対値の２乗をとれば得られる［(7.1.36)を見よ］．全断面積を求めると

$$\begin{aligned} \sigma_{全体} &= \int |f(\theta)|^2\,d\Omega \\ &= \frac{1}{k^2}\int_0^{2\pi} d\phi \int_{-1}^{1} d(\cos\theta)\sum_l\sum_{l'}(2\,l+1)(2\,l'+1) \end{aligned}$$

$$\times\, e^{i\sigma_l}\sin\delta_l e^{-i\sigma_{l'}}\sin\delta_{l'}\, P_l(\cos\theta)P_{l'}(\cos\theta)$$

$$= \frac{4\,\pi}{k^2}\sum_l (\,2\,l+1\,)\sin^2\delta_l \qquad (7.6.18)$$

となる．ここで，以前に一般的議論によって得られた光学定理(7.3.1)を確かめることができる．必要な計算は単に(7.6.17)を用いて

$$\mathrm{Im}f(\theta=\,0\,)=\sum_l \frac{(\,2\,l+1\,)\mathrm{Im}[e^{i\sigma_l}\sin\delta_l]}{k}\,P_l(\cos\theta)\Big|_{\theta=0}$$

$$=\sum_l \frac{2\,l+1}{k}\sin^2\delta_l \qquad (7.6.19)$$

のようにすればよい．これは $4\,\pi/k$ の因子を別にして(7.6.18)式と同じである．

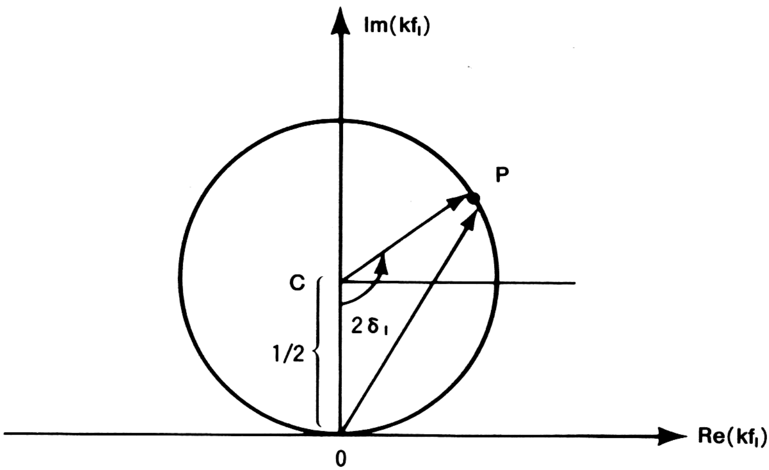


図 7.6. kf_l に対するアーガンド図形．OP は kf_l の大きさ，CO, CP はユニタリー円の周上の点と中心を結ぶ長さ 1/2 の半径である．角度 OCP$=2\delta_l$.

エネルギーの関数として δ_l は変化し，$f_l(k)$ もまた変化する．(7.6.13)のユリタリー関係式は，f_l がどのように変化するかの制限を与える．これをもっとも分かり易く見るには，kf_l に対してアーガンド図形（Argand

diagram）を描くのがよい．図7.6に示すように複素平面内に kf_l をプロットする．(7.6.16)式より

$$kf_l = \frac{i}{2} + \frac{1}{2}e^{-i\pi/2+2i\delta_l} \tag{7.6.20}$$

であることに気付けば，図の説明は自ずと分かるであろう．**ユニタリー円**と呼ばれる半径1/2の円があり，kf_l は必ずこの上にのっていることに注意しよう．

図7.6から多くの重要なことが分かる．いま δ_l が小さいとしよう．すると f_l はこの円の底の近くになければならない．正にも負にもなるが，f_l はほとんど実数値をとる：

$$f_l = \frac{e^{i\delta_l}\sin\delta_l}{k} \simeq \frac{(1+i\delta_l)\delta_l}{k} \simeq \frac{\delta_l}{k} \tag{7.6.21}$$

一方 δ_l が $\pi/2$ に近いときは kf_l はほとんど純虚数であり，kf_l の大きさは最大である．このような条件の下では，l 番目の部分波の共鳴が予想されるが，共鳴に関しては7.8節で少し詳しく議論しよう．最大の部分波断面積

$$\sigma_{\max}^{(l)} = 4\pi\lambda\!\!\!^{-2}(2l+1) \tag{7.6.22}$$

が達成されるのは $\sin^2\delta_l = 1$ のときであることに注目しよう［(7.6.18)を見よ］．

アイコナール近似との関連

7.4節で議論したアイコナール近似は，高エネルギー（$\lambda\!\!\!^{-} \ll$ ポテンシャルの到達距離 R）で有効である．この領域では多くの部分波の寄与があり，l を連続変数と見なして構わない．半古典論的議論では $l = bk$ となる（b を衝突径数とし運動量を $p = \hbar k$ とするとき角運動量は $l\hbar = bp$ であるから）ことに注意しよう．そこで

$$l_{\max} = kR \tag{7.6.23}$$

ととり，表式(7.6.17)の中で次のような置き換えをしよう：

$$\sum_{l}^{l_{\max}=kR} \to k\int db, \quad P_l(\cos\theta) \overset{\substack{l\,大\\ \theta\,小}}{\simeq} J_0(l\theta) = J_0(kb\theta), \quad \delta_l \to \Delta(b)\Big|_{b=l/k}. \tag{7.6.24}$$

ここで $l_{\max}=kR$ としたので $l>l_{\max}$ に対しては

$$e^{2i\delta_l}-1 = e^{2i\Delta(b)}-1 = 0 \tag{7.6.25}$$

となる．以上により

$$f(\theta) \to k\int db\,\frac{2\,kb}{2\,ik}(e^{2i\Delta(b)}-1)J_0(kb\theta)$$

$$= -ik\int dbb\,J_0(kb\theta)[e^{2i\Delta(b)}-1] \tag{7.6.26}$$

が得られる［訳註：これは以前アイコナール近似で得た表式(7.4.13)である］．δ_l は(7.4.14)で与えられる $\Delta(b)$ の具体的な形を用いて計算できる（この章末の問題7を参照）．

位相のずれの決定

ポテンシャル V が与えられたとき実際どのように位相のずれを決定したらよいかを，これから考察しよう．R をポテンシャルの到達距離とし，$r>R$ に対して V がゼロになると仮定する．外側で（すなわち $r>R$ に対して）波動関数は自由な球面波の波動関数であるに違いない．しかしこの時，原点は考察から除外されるので $n_l(r)$ を除外する理由がない．したがって波動関数は $j_l(kr)P_l(\cos\theta)$ と $n_l(kr)P_l(\cos\theta)$ との，あるいは同値であるが $h_l^{(1)}P_l$ と $h_l^{(2)}P_l$ の線形結合である．ここで $h_l^{(1)}$ と $h^{(2)}{}_l$ は

$$h_l^{(1)} = j_l + in_l, \qquad h_l^{(2)} = j_l - in_l \tag{7.6.27}$$

で定義される球ハンケル関数であって，それらの漸近的ふるまいは

$$h_l^{(1)} \xrightarrow{r\,大} \frac{e^{i(kr-l\pi/2)}}{ikr},$$
$$h_l^{(2)} \xrightarrow{r\,大} -\frac{e^{-i(kr-l\pi/2)}}{ikr} \qquad (7.6.28)$$

のようである（付録 A を見よ）．

任意の r における波動関数は，このとき

$$\langle \boldsymbol{x}|\psi^{(+)}\rangle = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\sum i^l(2l+1)A_l(r)P_l(\cos\theta) \quad (r>R) \qquad (7.6.29)$$

のように表わせる．$r>R$ に対して（動径波動関数は）

$$A_l(r) = c_l^{(1)}h_l^{(1)}(kr) + c_l^{(2)}h_l^{(2)}(kr) \qquad (7.6.30)$$

であり，この式の中の係数は $V=0$ としたときあらゆるところで $A_l(r)$ が $j_l(kr)$ と一致するように選ぶ．(7.6.29)と(7.6.30)で与えられる遠方 r での波動関数のふるまいを，(7.6.28)を用いて

$$\frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\sum_l(2l+1)P_l\left[\frac{e^{2i\delta_l}e^{ikr}}{2ikr} - \frac{e^{-i(kr-l\pi)}}{2ikr}\right] \qquad (7.6.31)$$

[以前得た表式(7.6.8)] と比較する．明らかに

$$c_l^{(1)} = \frac{1}{2}e^{2i\delta_l}, \qquad c_l^{(2)} = \frac{1}{2} \qquad (7.6.32)$$

が得られる．こうして $r>R$ に対する動径波動関数は

$$A_l(r) = e^{i\delta_l}[\cos\delta_l\, j_l(kr) - \sin\delta_l\, n_l(kr)] \qquad (7.6.33)$$

のように表わされる．この表式を用いると $r=R$——すなわちポテンシャルの及ぶ領域のすぐ外側——での対数微分を次のように計算できる：

$$\beta_l \equiv \left(\frac{r}{A_l}\frac{dA_l}{dr}\right)_{r=R}$$

$$= kR\left[\frac{j_l'(kR)\cos\delta_l - n_l'(kR)\sin\delta_l}{j_l(kR)\cos\delta_l - n_l(kR)\sin\delta_l}\right] \quad . \tag{7.6.34}$$

この中で $j_l'(kR)$ は j_l の kr に関する微分であり，$kr = kR$ で計算したものを表わす．逆に R における対数微分が分かると，位相のずれを

$$\tan\delta_l = \frac{kRj_l'(kR) - \beta_l j_l(kR)}{kRn_l'(kR) - \beta_l n_l(kR)} \tag{7.6.35}$$

と決めることができる．こうして，位相のずれを決定する問題は，β_l を求める問題に帰着する．

次に $r<R$，すなわちポテンシャルの到達範囲の内側でのシュレーディンガー方程式の解を見つけよう．球対称ポテンシャルに対しては，3次元のシュレーディンガー方程式を同値な1次元方程式

$$\frac{d^2u_l}{dr^2} + \left(k^2 - \frac{2m}{\hbar^2}V - \frac{l(l+1)}{r^2}\right)u_l = 0 \tag{7.6.36}$$

を調べることによって解くことができる．ここで

$$u_l = rA_l(r) \tag{7.6.37}$$

には境界条件

$$u_l\big|_{r=0} = 0 \tag{7.6.38}$$

がつく．この1次元シュレーディンガー方程式を $r = 0$ から出発して $r = R$ まで――必要ならば数値的に――積分する．こうして R における対数微分が得られる．連続性の要請から $r = R$ において，内側の解と外側の解の対数微分は合致していなければならない：

$$\beta_l\big|_{\text{内側の解}} = \beta_l\big|_{\text{外側の解}} \quad . \tag{7.6.39}$$

この式の左辺は，シュレーディンガー方程式を $r = R$ まで積分して得られる．

一方，右辺は波動関数の遠方でのふるまいを特徴づける位相のずれによって表わすことができる．これは位相のずれが，内側の解に対する β_l を $\tan\delta_l$ の表式［(7.6.35)］に単に代入すれば得られることを意味している．別の方法として $A_l(r)$ に対する積分方程式を導き，それから位相のずれを求めることも可能である（この章末の問題8を参照）.

剛体球による散乱

一つの例を解いてみよう．堅いすなわち剛体の球

$$V = \begin{cases} \infty, & r<R \text{に対して} \\ 0, & r>R \text{に対して} \end{cases} \tag{7.6.40}$$

による散乱を考察する．この問題では β_l（実際は ∞ である）を計算する必要すらない．球の内側に波が入らないので $r=R$ で波動関数が必ずゼロになることを知っていれば十分である．このとき

$$A_l(r)\Big|_{r=R} = 0 \tag{7.6.41}$$

と(7.6.33)から

$$j_l(kR)\cos\delta_l - n_l(kR)\sin\delta_l = 0 \tag{7.6.42}$$

すなわち

$$\tan\delta_l = \frac{j_l(kR)}{n_l(kR)} \tag{7.6.43}$$

が得られる．こうして位相のずれは任意の l に対して分かった．この導出には何の近似もしなかったことに注意しよう．

位相のずれの物理的意味を検討するために，特に $l=0$（S-波散乱）の場合を考えよう．等式(7.6.43)は $l=0$ に対して

$$\tan\delta_0 = \frac{\sin kR/kR}{-\cos kR/kR} = -\tan kR \tag{7.6.44}$$

となるので $\delta_0 = -kR$ となる．動径波動関数 (7.6.33) は $e^{i\delta_0}$ を別にして

$$A_{l=0}(r) \propto \frac{\sin kr}{kr}\cos\delta_0 + \frac{\cos kr}{kr}\sin\delta_0 = \frac{1}{kr}\sin(kr+\delta_0) \quad (7.6.45)$$

のように r の関数として変化する．したがって $rA_{l=0}(r)$ を距離 r の関数として図示すると正弦波が得られる．この波は自由粒子の正弦波と比較して R だけずれている．図7.7を参照せよ．

ここで $\tan\delta_l$ の低エネルギー極限と高エネルギー極限を調べよう．低エネルギーとは小さい kR ($kR \ll 1$) を意味する．このときは（付録 A を参照）

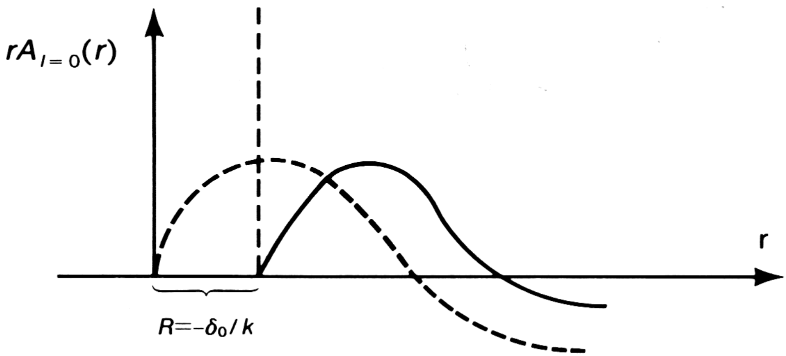


図 7.7. $rA_{l=0}(r)$ を r に対して描いた図（$e^{i\delta_0}$ の因子は除いてある）．破線の曲線は $V=0$ に対するもので，$\sin kr$ のように振舞う．実線の曲線は半径 R の剛体球による S-波散乱を表わすもので，$V=0$ の場合にくらべて $R=-\delta_0/k$ だけずれている．

$$j_l(kr) \simeq \frac{(kr)^l}{(2l+1)!!}$$

$$n_l(kr) \simeq -\frac{(2l-1)!!}{(kr)^{l+1}} \quad (7.6.46)$$

を用いることができ

$$\tan\delta_l = \frac{-(kR)^{2l+1}}{\quad} \quad (7.6.47)$$

が得られる．したがって $l \neq 0$ の δ_l は無視して構わない．いいかえれば S-波散乱だけが重要である．これは実際，到達距離が有限なほとんどのポテンシャルに対して，低エネルギーで期待されることである．k が大きいにせよ小さいにせよ $\delta_0 = -kR$ であるから

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\sin^2\delta_0}{k^2} = R^2 , \qquad kR \ll 1 \text{ に対して} \tag{7.6.48}$$

が得られる．全断面積は

$$\sigma_{\text{全体}} = \int \frac{d\sigma}{d\Omega}\, d\Omega = 4\pi R^2 \tag{7.6.49}$$

で与えられ，幾何学的断面積 πR^2 の 4 倍であることは興味深い．幾何学的断面積とは，平面波の進行を阻止する半径 R の円板の面積（剛体球と同じ断面積）を意味する．低エネルギー散乱は当然，非常に長い波長の散乱を意味している．この場合，古典的にもっともな結果が必ずしも期待できない．[†]

高エネルギーでの状況は半古典論の場合と似ているので，幾何学的断面積が高エネルギー散乱に対するもっともな結果ではないかと推量されるかもしれない．高エネルギーでは，$l \simeq kR$ までの多くの l の値が寄与すると仮定してよい．したがって全断面積は

$$\sigma_{\text{全体}} = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{l \simeq kR} (2l+1)\sin^2\delta_l \tag{7.6.50}$$

で与えられる．一方(7.6.43)を用いると

$$\begin{aligned}\sin^2\delta_l &= \frac{\tan^2\delta_l}{1+\tan^2\delta_l} = \frac{[j_l(kR)]^2}{[j_l(kR)]^2 + [n_l(kR)]^2} \\ &\simeq \sin^2\!\left(kR - \frac{\pi l}{2}\right)\end{aligned} \tag{7.6.51}$$

† 訳注：(7.6.49)は長波長の波が回折して包み込む球の表面積と解釈できる．

となる．ここで $kr \gg 1$ に対して

$$j_l(kr) \sim \frac{1}{kr}\sin\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right)$$

$$n_l(kr) \sim -\frac{1}{kr}\cos\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right) \tag{7.6.52}$$

を用いている．これより l が1単位ずつ増すごとに，δ_l が 90°ずつ減ることが分かる．隣接する一組の部分波に対しては $\sin^2\delta_l + \sin^2\delta_{l+1} = \sin^2\delta_l + \sin^2(\delta_l - \pi/2) = \sin^2\delta_l + \cos^2\delta_l = 1$ であり，(7.6.50)には非常に多くの l の値の寄与があるので $\sin^2\delta_l$ を平均値1/2で置き換えることが許される．l の和の項数も $2l+1$ の平均も，ほぼ kR である．以上のことを総合すると(7.6.50)は

$$\sigma_{\text{全体}} = \frac{4\pi}{k^2}(kR)^2\frac{1}{2} = 2\pi R^2 \tag{7.6.53}$$

となる．これも幾何学的断面積 πR^2 とは異なる！　そこで因子2の由来を知るために，(7.6.17)を二つの部分に分けよう：

$$f(\theta) \simeq \frac{1}{2ik}\sum_{l=0}^{kR}(2l+1)\,e^{2i\delta_l}P_l(\cos\theta) + \frac{i}{2k}\sum_{l=0}^{kR}(2l+1)P_l(\cos\theta)$$

$$= f_{\text{反射}} + f_{\text{影}}\ . \tag{7.6.54}$$

$\int |f_{\text{反射}}|^2 d\Omega$ を計算する際に，異なる l からの寄与の間に干渉がないことが $P_l(\cos\theta)$ の直交性により保証される．そこで部分波の寄与の2乗の和として

$$\int |f_{\text{反射}}|^2\, d\Omega = \frac{2\pi}{4k^2}\sum_{l=0}^{l_{\max}}\int_{-1}^{+1}(2l+1)^2[P_l(\cos\theta)]^2\, d(\cos\theta)$$

$$\simeq \frac{\pi l^2_{\max}}{k^2} = \pi R^2 \tag{7.6.55}$$

が得られる．次に $f_{\text{影}}$ に注意を向けると，まずこれが純虚数であることに気づ

く．この項は前方散乱の場合に特に大きい．$\theta = 0$ では $P_l(\cos\theta) = 1$ であり，いろいろな l の値からの寄与がコヒーレントにたし合わさるからである．すなわち同じ位相の純虚数であってこの場合は係数が正になっている．P_l に対して小角近似［(7.6.24)を見よ］が使えて

$$f_{\text{影}} \simeq \frac{i}{2k}\sum(2l+1)J_0(l\theta)$$

$$\simeq ik\int_0^R bdb\,J_0(kb\theta) = \frac{iRJ_1(kR\theta)}{\theta} \tag{7.6.56}$$

が得られる．ところでこれはまさに，光学で習うフラウンホーファーの回折公式であり $\theta \simeq 0$ の近くに大きなピークを持っている．$\xi = kR\theta$，$d\xi/\xi = d\theta/\theta$ と置くと

$$\int |f_{\text{影}}|^2\,d\Omega = 2\pi\int_{-1}^{1}\frac{R^2[J_1(kR\theta)]^2}{\theta^2}\,d(\cos\theta)$$

$$\simeq 2\pi R^2\int_0^\infty\frac{|J_1(\xi)|^2}{\xi}\,d\xi \simeq \pi R^2 \tag{7.6.57}$$

のように計算できる．最後に $f_{\text{影}}$ と $f_{\text{反射}}$ との間の干渉は消える：

$$\mathrm{Re}(f_{\text{影}}^* f_{\text{反射}}) \simeq 0\ . \tag{7.6.58}$$

$f_{\text{反射}}$ の位相は振動し$(2\delta_{l+1} = 2\delta_l - \pi)$平均すれば近似的にゼロとなり，一方 $f_{\text{影}}$ は純虚数だからである．したがって

$$\sigma_{\text{全体}} = \underset{\substack{\uparrow\\ \sigma_{\text{反射}}}}{\pi R^2} + \underset{\substack{\uparrow\\ \sigma_{\text{影}}}}{\pi R^2} \tag{7.6.59}$$

となる．

第２項（前方散乱にきくコヒーレントな寄与）が影と呼ばれるのは，

高エネルギーの剛体球散乱では，衝突径数が R より小さい波が必ず偏向を受けるからである．そこで散乱体のすぐ後では粒子を見出す確率は全くなく，影がつくられる．波動力学に従って述べるとこの影は，もとの波（散乱体がなくてもそこに存在する）と新たな散乱波との弱め合う干渉によるものである．したがって影を作るのには散乱が必要である．この影の散乱振幅が純虚数でなければならないことは，(7.6.8)を見れば l 番目の部分波に対する $e^{ikr}/2ikr$ の係数が $1+2ikf_l(k)$ のように振舞うことから分かるであろう．ここで1は散乱体がなくても，もともと存在するから，打消しが起るためには，f_l の中に正の係数の純虚数の項がなければならない．これは実際に光学定理の物理的解釈を与える．具体的に確かめてみよう．まず，$\mathrm{Im}\,[f_{反射}(0)]$ は位相が振動するため平均するとゼロになるので

$$\frac{4\pi}{k}\mathrm{Im}\,f(0)\simeq\frac{4\pi}{k}\mathrm{Im}[f_{影}(0)] \qquad (7.6.60)$$

であることに気付く．(7.6.54)式を用いると

$$\frac{4\pi}{k}\mathrm{Im}\,f_{影}(0)=\frac{4\pi}{k}\mathrm{Im}\left[\frac{i}{2k}\sum_{l=0}^{kR}(2l+1)P_l(1)\right]\simeq 2\pi R^2 \qquad (7.6.61)$$

が得られ，まさに $\sigma_{全体}$ に等しい．

7.7　低エネルギー散乱と束縛状態

低エネルギーでは——もっと正確にいうと $\lambda\!\!\!^{-}=1/k$ がポテンシャルの到達距離 R と同じ程度か大きいときには——l が大きな部分波は一般に重要でない．このことは，粒子が遠心力の障壁を透過できず，その結果，障壁の内側のポテンシャルは影響を与えないことから，古典的に明らかであろう．量子力学でいえば，l 番目の部分波に対する有効ポテンシャルは

$$V_{\mathrm{eff}}=V(r)+\frac{\hbar^2}{2m}\frac{l(l+1)}{r^2} \qquad (7.7.1)$$

で与えられる．$l \neq 0$ の束縛状態を $E \simeq 0$ の近傍に作るほどポテンシャルが強くない限り，動径波動関数の振舞いは主に遠心力の障壁の項で決められ，すなわち $j_l(kr)$ と似かよったものになるに違いない．より定量的にいえば，位相のずれの様子を，部分波に対する積分方程式を用いて評価することが可能である（この章末の問題 8 を参照）：

$$\frac{e^{i\delta_l}\sin\delta_l}{k} = -\frac{2m}{\hbar^2}\int_0^\infty j_l(kr)\,V(r)\,A_l(r)\,r^2dr\ . \qquad (7.7.2)$$

$A_l(r)$ が $j_l(kr)$ とあまり異ならず，$1/k$ がポテンシャルの到達距離よりずっと大きいならば，右辺は k^{2l} のように変化するであろう．また，左辺は δ_l が小さいとき，δ_l/k のように変化する．したがって位相のずれは，k が小さいとき

$$\delta_l \sim k^{2l+1} \qquad (7.7.3)$$

のようにゼロに近づく．これは**しきいでの振舞い**（threshold behavior）と呼ばれている．

以上により，到達距離が有限なポテンシャルによる低エネルギーの散乱では，S-波散乱が重要であることが明らかになった．

四角い井戸または障壁

話を具体的にするために

$$V = \begin{cases} V_0 = \text{一定} & r < R \text{に対して} \\ 0 & \text{それ以外} \end{cases}$$

$$V_0 > 0 \quad \text{斥力ポテンシャル},$$
$$V_0 < 0 \quad \text{引力ポテンシャル} \qquad (7.7.4)$$

による S-波散乱を考察しよう．ここから得られる多くの特徴は，到達距離が有限なもっと複雑なポテンシャルに対しても共通である．

既に知っているようにポテンシャルの外側での波動関数は［(7.6.33)および(7.6.45)を見よ］

$$e^{i\delta_0}[j_0(kr)\cos\delta_0 - n_0(kr)\sin\delta_0] \simeq \frac{e^{i\delta_0}\sin(kr+\delta_0)}{kr} \qquad (7.7.5)$$

のように振舞う．内側の解も一定の V_0 に対しては容易に得られ，$r = 0$ で $u = 0$ という境界条件を用いて

$$u \equiv r A_{l=0}(r) \propto \sin k'r \qquad (7.7.6)$$

となる．この k' は

$$E - V_0 = \frac{\hbar^2 k'^2}{2m} \qquad (7.7.7)$$

から決められる．いいかえれば $E > V_0$ の限り内側の波動関数も正弦関数である．この正弦波の曲率は自由粒子の場合と異なっている．その結果，図7.8に見られるように $V_0 < 0$（引力）か $V_0 > 0$（斥力）かに応じ，波動関数は中心に引き込まれる($\delta_0 > 0$)か押し出される($\delta_0 < 0$)．(7.7.6)と(7.7.7)が $V_0 > E$ のときにも sin を sinh と読みかえれば成立することに注意しよう．すなわち波動関数は

$$u(r) \propto \sinh[\kappa r], \qquad (7.7.6')$$

$$\frac{\hbar^2\kappa^2}{2m} = V_0 - E \qquad (7.7.7')$$

のように振舞う．

ここでもっぱら引力の場合を考え，V_0 の大きさを増加させるとしよう．引力が大きくなると波動関数の曲率も大きくなる．引力の強さが増大し，$[0,\ R]$ の間に正弦波の4分の1周期がちょうどおさまるようになったとする†．このとき位相のずれは $\delta_0 = \pi/2$ であり $\sin^2\delta_0$ は1となるので，与えられた k

† 訳注：以下の議論では $kR \ll 1$，すなわち低エネルギー極限を想定している．

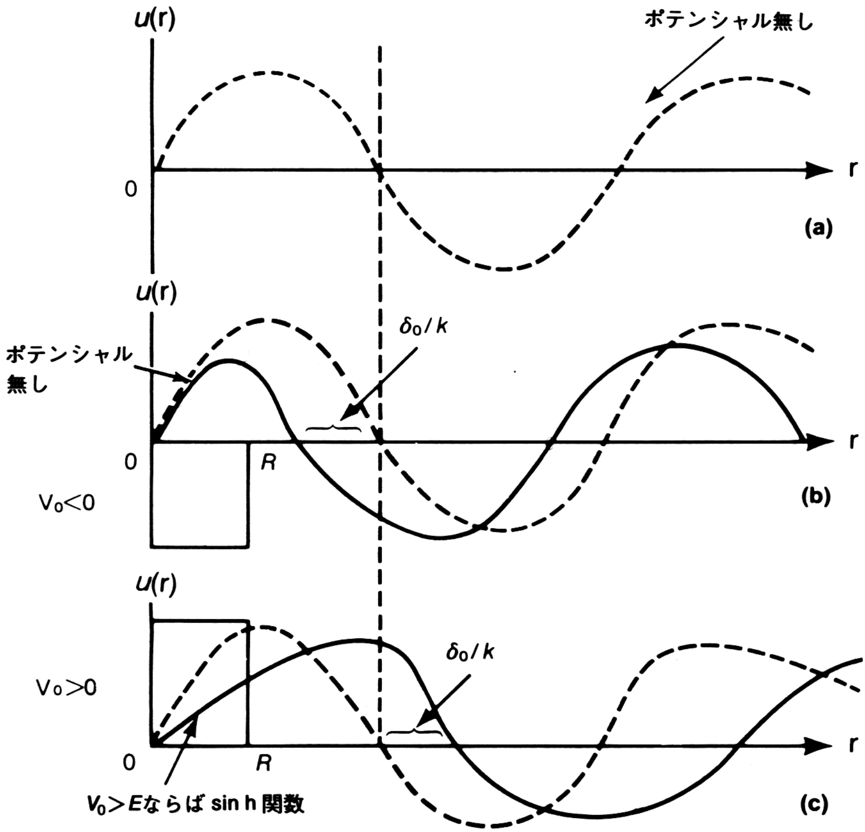


図 7.8. $u(r)$ を r に対して描いた図. (a) $V=0$ の場合(破線の曲線). (b) $V_0<0$ の場合. 波動関数(実線の曲線)は内側に引き込まれ $\delta_0>0$. (c) $V_0>0$ の場合. 波動関数(実線の曲線)は外側に押し出され $\delta_0<0$.

に対して最大の S-波断面積が得られる. [訳註:これを**ユニタリティー極限**という.] さて井戸の深さ V_0 をさらに深くしよう. ついには引力が十分強くなり, 正弦波の半周期がポテンシャル半径の中におさまるようにできる. 位相のずれはこのとき π である. いいかえると R の外側での波動関数は, 自由粒子の波動関数にくらべて180°位相がずれている. 注目すべきことに非常に強い引力ポテンシャルにも拘らず, 部分波の断面積がゼロ ($\sin^2\delta_0 = 0$)

$$\sigma_{l=0} = 0 \tag{7.7.8}$$

になるのである．その上，もしエネルギーが十分低く $l \neq 0$ の波が依然重要でないならば，入射波はほとんど完全に透過する．このような現象は**ラムザウアー-タウンゼンド効果**と呼ばれ，現実にアルゴン，クリプトンおよびキセノンといった希ガス原子による電子散乱で，実験的に観測される．この効果が初めて観測されたのは，波動力学が誕生する以前の1923年であり，大きな謎と考えられていた．

ゼロ・エネルギー散乱と束縛状態

極端に低いエネルギー($k \simeq 0$)での散乱を考察しよう．$r > R$ かつ $l = 0$ に対して，外側の動径波動関数は

$$\frac{d^2u}{dr^2} = 0 \tag{7.7.9}$$

を満足する．(7.7.9)の解は明らかに

$$u(r) = \text{定数}\cdot(r-a) \tag{7.7.10}$$

すなわち直線である！　これは外側の波動関数の通常の表式［(7.6.37)と(7.6.45)を見よ］の長波長極限として

$$\lim_{k\to 0}\sin(kr+\delta_0) = \lim_{k\to 0}\sin\left[k\left(r+\frac{\delta_0}{k}\right)\right] \tag{7.7.11}$$

を用いて理解できる．この式は極限で(7.7.10)と似ている．二つを比較すると

$$\frac{u'}{u} = k\cot\left[k\left(r+\frac{\delta_0}{k}\right)\right] \xrightarrow{k\to 0} \frac{1}{r-a} \tag{7.7.12}$$

の関係がある．ここで $r = 0$ と置くと［$r = 0$ で(7.7.10)は正しい波動関数でないが］

$$\lim_{k\to 0} k\cot\delta_0 \xrightarrow{k\to 0} -\frac{1}{a} \tag{7.7.13}$$

が得られる．この a という量は**散乱半径**と呼ばれている．全断面積の $k\to 0$ の極限は

$$\sigma_{全体} = \sigma_{l=0} = 4\pi \lim_{k\to 0} \left| \frac{1}{k\cot\delta_0 - ik} \right|^2 = 4\pi a^2 \tag{7.7.14}$$

で与えられる［(7.6.16)を参照］.

ポテンシャルの到達距離 R と a とは同じ次元であるが，a と R はけた違いの大きさであることがある．特に引力ポテンシャルの場合，散乱半径の値はポテンシャルの到達距離に較べて遙かに大きくなることがある．a の物理的意味をつかむために，a は外側の波動関数が r-軸を切る座標に他ならないことに注目しよう．斥力ポテンシャルに対しては，$a>0$ であり図7.9a に見るようにおよそ R の程度である．しかし引力ポテンシャルに対しては切片は負の側にある（図7.9b）．引力を強くすると，外側の波動関数は r-軸を再び正の側で横切ることができる（図7.9c）.

引力を強くすると a の符号が変わることは，束縛状態が発生することと関連している．この点を定量的に見るために，a が正で非常に大きいとき，図7.9c にあるように波動関数は $r>R$ で実質上たいらであることに注意する．ところで(7.7.10)で a を非常に大きくしたものは，$e^{-\kappa r}$ で κ をゼロに近づけたものと大差ない．ところで $\kappa\simeq 0$ とした $e^{-\kappa r}$ は，まさに負の無限小のエネルギーを持つ束縛状態の，$r>R$ における波動関数である．内側の波動関数 $(r<R)$ は，$E=0_+$ の場合（運動エネルギーがゼロの散乱状態）でも，$E=0_-$ の場合（無限小の束縛エネルギーの束縛状態）でも実質的に同じである．両方の場合とも $\sin k'r$ ［(7.7.6)］の k' は，E を無限小（正または負）として

$$\frac{\hbar^2 k'^2}{2m} = E - V_0 \simeq |V_0| \tag{7.7.15}$$

から決められる.

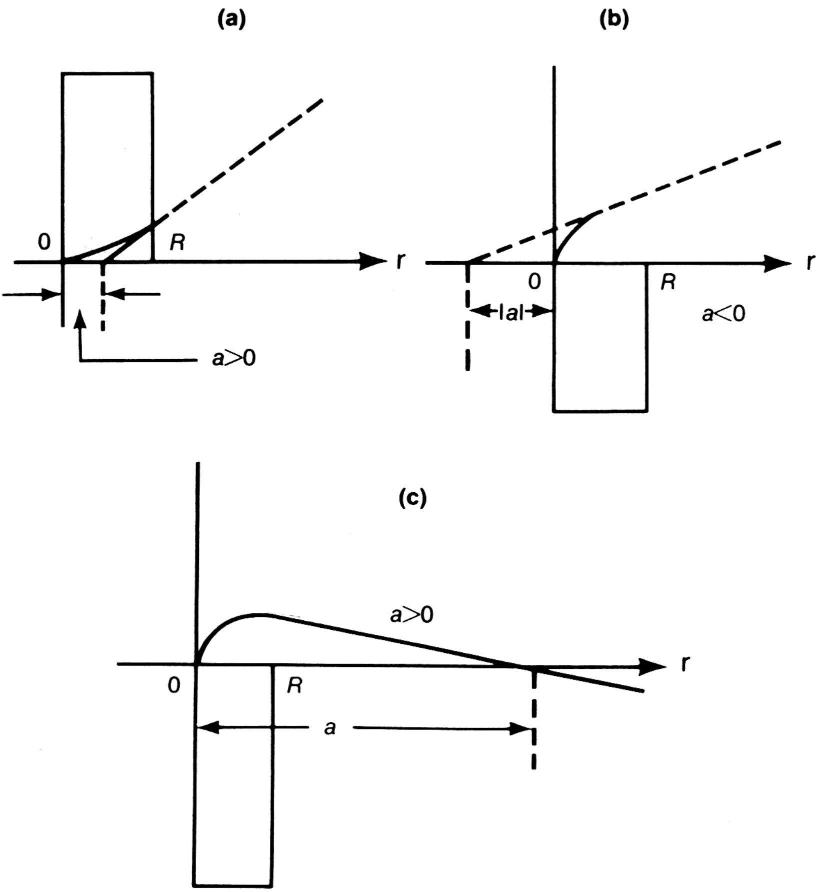


図 7.9. $u(r)$ を r に対して描いた図. (a) 斥力ポテンシャル. (b) 引力ポテンシャル. (c) 深い引力ポテンシャル. それぞれの場合についてエネルギーがゼロの外側の波動関数と r-軸との切片 a が示してある.

この二つの物理的状況（$E=0_+$ と $E=0_-$）に対し内側の波動関数は同じなので，束縛状態の波動関数の対数微分を，運動エネルギーがゼロの散乱を表わす解のそれと等置することができる：

$$-\left.\frac{\varkappa e^{-\varkappa r}}{e^{-\varkappa r}}\right|_{r=R}=\left.\frac{1}{r-a}\right|_{r=R}. \tag{7.7.16}$$

すなわち $R \ll a$ の場合

$$\varkappa \simeq \frac{1}{a} \tag{7.7.17}$$

が得られる．束縛エネルギーは

$$E_{\mathrm{BE}} = -E_{\text{束縛状態}} = \frac{\hbar^2 \varkappa^2}{2m} \simeq \frac{\hbar^2}{2ma^2} \tag{7.7.18}$$

を満足し，散乱半径と束縛状態のエネルギーの間には関係がある．これは著しい結果である．すなわち，ゆるい束縛状態があるときはその束縛エネルギーを，運動エネルギーがゼロに近い散乱の実験を行うことで推測できる．ただし a の測定値が，ポテンシャル到達距離 R に比較して大きい場合である．散乱半径と束縛状態のエネルギーとの関連は，ウィグナーによって初めて指摘された．彼は (7.7.18)式を np-散乱に適用することを試みた．

実験では，np 系の $^3S_1$-状態に束縛状態がある．すなわち

$$E_{\mathrm{B.E}} = 2.22\,\mathrm{MeV} \tag{7.7.19}$$

の重陽子である．一方，散乱半径は

$$a_{\text{三重項}} = 5.4 \times 10^{-13}\mathrm{cm} \tag{7.7.20}$$

と測定されており，これより束縛エネルギーは

$$\frac{\hbar^2}{2\mu a^2} = \frac{\hbar^2}{m_N a^2} = m_N c^2 \left(\frac{\hbar}{m_N ca}\right)^2$$

$$= (938\,\mathrm{MeV}) \left(\frac{2.1 \times 10^{-14}\mathrm{cm}}{5.4 \times 10^{-13}\mathrm{cm}}\right)^2 = 1.4\,\mathrm{MeV} \tag{7.7.21}$$

と予測される．ここで μ は換算質量で，$m_{n,p}/2$ と近似した．(7.7.19)と(7.7.21)とは十分満足できるほど一致していない．この不一致の原因は，二つ

の内側の波動関数が厳密には一致しないことと，重陽子に対して $a_{三重項} \gg R$ はあまりよい近似でないことにある．もう少しよい結果は，k の関数である $k \cot\delta$ の展開を次の項までとって

$$k \cot\delta_0 = -\frac{1}{a} + \frac{1}{2} r_0 k^2 \tag{7.7.22}$$

とすると得られる．ここで r_0 は有効距離と呼ばれるものである（例えば Preston, 1962, p.23参照）．

$S_l(k)$ の極としての束縛状態

この節の終りに，振幅 $S_l(k)$ の解析的性質を $l=0$ の場合に調べよう．(7.6.8)式と(7.6.12)式に戻ると，$l=0$ の動径波動関数は遠方で

$$S_{l=0}(k)\frac{e^{ikr}}{r} - \frac{e^{-ikr}}{r} \tag{7.7.23}$$

に比例していることが分かる．これを束縛状態の遠方での波動関数

$$\frac{e^{-\varkappa r}}{r} \tag{7.7.24}$$

と比較しよう．束縛状態が存在するときは，シュレーディンガー方程式の $E<0$ の意味のある解は，$\varkappa$ の特別な（とびとびの）値に対してのみ存在する．関数 $e^{-\varkappa r}/r$ は e^{ikr}/r において k を純虚数にしたものと考えることができよう．k が純虚数であること以外に(7.7.23)と(7.7.24)との重要な差は，束縛状態の場合には入射波に類似な項がなくても $e^{-\varkappa r}/r$ が存在していることである．ごく一般的に，e^{ikr}/r の係数と e^{-ikr}/r の係数の比のみが物理的に重要であり，この比を与えるのが $S_l(k)$ である．束縛状態の場合，入射波がないとしても外向波（虚数の k を持つ）を持つことができる．すると比は ∞ であり，これは $S_{l=0}(k)$ を複素変数 k の関数と見なしたとき，$k=i\varkappa$ の極を持つことを意味する．このように束縛状態では，複素 k-平面の虚軸上の正の側に極（これは単

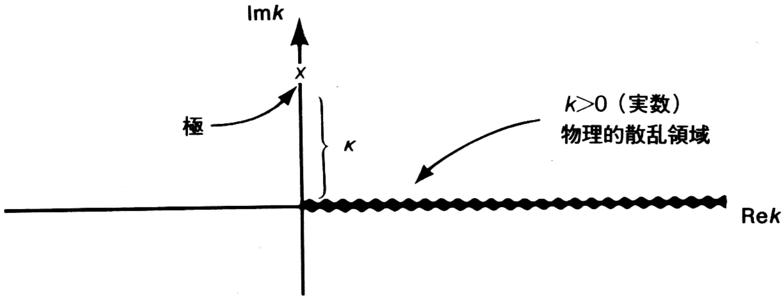


図 7.10.　束縛状態の極が $k=+i\kappa$ にある複素 k-平面.

純な極であることが示せる）がある．[図7.10を見よ]　正の実数に対しては，物理的散乱が対応する．ここで δ_0 を実数として［(7.6.14)と比較せよ］

$$S_{l=0}=e^{2i\delta_0} \tag{7.7.25}$$

を要請する．さらに $k\to 0$ のとき $k\cot\delta_0$ は有限の極限値 $-1/a$ ［(7.7.13)］を持つので，δ_0 は

$$\delta_0\to 0,\ \pm\pi,\ \cdots\cdots \tag{7.7.26}$$

のように振舞わなければならない．したがって $k\to 0$ のとき $S_{l=0}=e^{2i\delta_0}\to 1$ である．

ここで $S_{l=0}(k)$ として次の条件を満足する簡単な関数を構成することを試みよう：

1．$k=i\kappa$ に極（束縛状態の存在）.

2．$k>0$（実数）に対し $|S_{l=0}|=1$（ユニタリー性）.

3．$k=0$ で $S_{l=0}=1$（しきいでの振舞い）.　　(7.7.27)

(7.7.27)の三つの条件をすべて満足するもっとも簡単な関数は

$$S_{l=0}(k)=\frac{-k-i\kappa}{k-i\kappa} \tag{7.7.28}$$

である．この形を選択したときに，束縛状態の極以外に重要な特異性が存在し

ないことを暗黙の仮定とした．続いて(7.6.15)を用いると，$f_{l=0}(k)$に対して

$$f_{l=0}=\frac{S_{l=0}-1}{2\,ik}=\frac{1}{-\varkappa-ik} \qquad (7.7.29)$$

が得られる．これを(7.6.16)

$$f_{l=0}=\frac{1}{k\cot\delta_0-ik} \qquad (7.7.30)$$

と比較すると

$$\lim_{k\to 0}k\cot\delta_0=-\frac{1}{a}=-\varkappa \qquad (7.7.31)$$

であることが分かる．これはまさに，束縛状態と散乱半径の関係式［(7.7.17)］である．

このようなことから，複素 k-平面における $S_l(k)$ の解析性とユニタリー性を利用することにより，シュレーディンガー方程式を具体的に解いて得ることのできるような情報が得られることが分かる．このような技法は，ポテンシャルの詳細が分からない問題を解く際に非常に有効になり得る．

7.8　共鳴散乱

原子物理，核物理，素粒子物理で，ある決まった部分波に対する散乱断面積が著しいピークを示す場面に，たびたび出会う．この節ではそうした**共鳴**の力学を扱う．

引き続き，到達距離が有限なポテンシャル $V(r)$ を考えよう．l 番目の部分波の動径波動関数に対する有効ポテンシャルは，(7.7.1)で与えられたように $V(r)$ に遠心力の障壁を加えたものである．$V(r)$ 自身は引力的であると仮定しよう．第2項

$$\frac{\hbar^2}{2\,m}\frac{l(l+1)}{r^2}$$

が斥力的であるから，有効ポテンシャルは図7.11に見られるように引力的な井戸に続いて少し遠くで反発的な障壁を持つようになる.

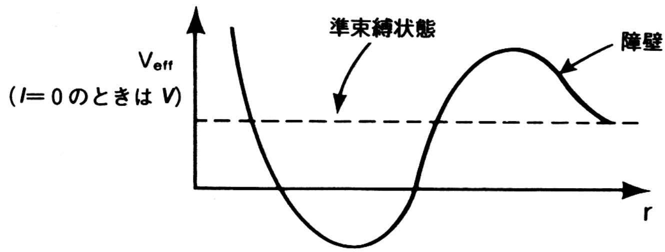


図 7.11.　$V_{eff}=V(r)+(\hbar^2/2m)[l(l+1)/r^2]$ の r 依存性．$l\neq 0$ の場合，障壁は $(\hbar^2/2m)[l(l+1)/r^2]$ によっても作られる．$l=0$ の場合，障壁は V それ自身によって作られる.

仮にこの障壁が無限に高いとしよう．すると粒子を内側に捕えることができる．いいかえれば $E>0$ の束縛状態が期待できる．これは真の束縛状態であって，定まった E の値を持つハミルトニアンの固有状態である．すなわち寿命が無限大の定常状態である.

もっと現実的に障壁が有限な場合には，粒子は内側に捕えられはするが，永久につかまっているわけではない．こうした束縛状態は，量子力学的トンネル効果によって有限な寿命を持つ．いいかえれば，粒子は障壁をつき抜けて外側へ漏れ出す．障壁が無限に高ければ真の束縛状態になるであろうから，このような状態を，**準束縛状態**と呼ぶことにする.

これに対応する散乱の位相のずれ δ_l は，入射エネルギーが準束縛状態を作るエネルギー値を越えて増加するとき，$\pi/2$の値を通過して増加する．そのとき対応する部分波の断面積も，取り得る最大値 $4\pi(2l+1)/k^2$ になる.

ある既知のポテンシャルに対して，具体的な計算によりこの点を確かめることは教育的である．数値計算の結果，球対称な井戸型ポテンシャルでは，$l\neq 0$ のとき共鳴的振舞いが実際に可能なことが示される．図7.12には $2mV_0R^2/\hbar^2=5.5$の球対称な井戸での，$l=3$ に対する結果が，具体的に示してある．非常に低いエネルギーでは小さかった位相が（図7.12b），$k=1$

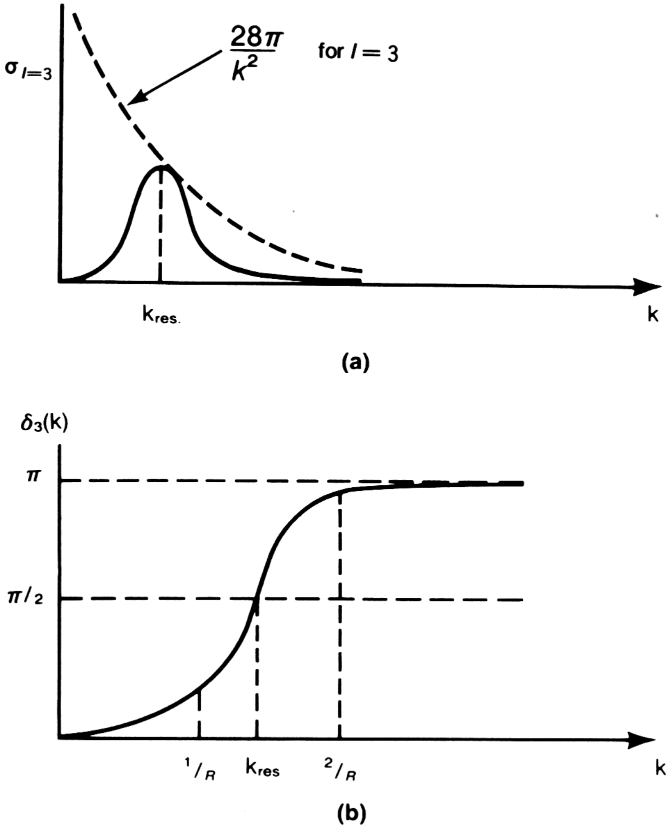


図 7.12. (a) $\sigma_{l=3}$ を k に対して描いた図．共鳴点で $\delta_3(k_{\rm res})=\pi/2$ で $\sigma_{l=3}=(4\pi/k_{\rm res}^2)\times 7=28\pi/k_{\rm res}^2$．(b) $\delta_3(k)$ を k に対して描いた図．これらの曲線は $2mV_0R^2/\hbar^2=5.5$ の球形の井戸に対応する．

$/R$ を過ぎて急速に増加しはじめ，$k=1.3/R$ あたりで $\pi/2$ を通過する．

非常に教訓的なもう一つの例は，厳密に解ける反発的 δ-殻ポテンシャル

$$\frac{2m}{\hbar^2}V(r)=\gamma\,\delta(r-R) \tag{7.8.1}$$

である（この章末の問題 9 を参照）．この場合，δ-殻ポテンシャルそれ自身が，

$0 < r < R$ の領域に粒子を捕捉できるから，$l = 0$ に対して共鳴が可能である．$\gamma = \infty$ のとき，$r < R$ の領域内に

$$kR = \pi,\ \ 2\pi,\ \cdots\cdots \tag{7.8.2}$$

の一連の束縛状態が期待できる．これは $l = 0$ の動径波動関数が，$r = 0$ だけでなくこの場合 $r = R$ においてもゼロにならなければならないからである．$r > R$ の領域では単なる剛体球散乱と同じで

$$\delta_0 = -kR \tag{7.8.3}$$

で与えられる S 波の位相のずれがある．$\gamma = \infty$ とすると $r = R$ にある壁は粒子を透過させないから，二つの問題の間に関連がない．

この事情は障壁の高さを有限にすればもっと面白くなることが，具体的に示せる．散乱の位相のずれは

$$E_{\text{入射}} \simeq E_{\text{準束縛状態}} \tag{7.8.4}$$

であればいつも，共鳴的振舞いを示す．さらに γ が大きくなればなるほど，共鳴のピークは鋭くなる．しかし共鳴からはずれたところで，δ_0 は剛体球の位相に非常に似ている．したがってなめらかに変化する背景散乱に重なって，共鳴的な振舞いが現われる．これは中性子と核の散乱の模型となる．この散乱ではなめらかに変化する断面積の上に，一連の鋭い共鳴のピークが観測される．

共鳴散乱の一般的議論に戻り，散乱振幅が共鳴エネルギーの近傍でどのように変化するかを調べよう．σ_l が大きいことと準束縛状態とを関係づけていくと，さきに議論したように，δ_l は小さい側から $\pi/2$（または $3\pi/2$, ……）を横切らなければならない．いいかえれば，$\cot\delta_l$ は正の側からゼロを通過しなければならない．共鳴の近傍，すなわち

$$E \simeq E_r \tag{7.8.5}$$

で $\cot\delta_l$ がなめらかに変化すると仮定して，$\cot\delta_l$ を

$$\cot\delta_l = \underbrace{\cot\delta_l\Big|_{E=E_r}}_{\substack{\parallel \\ 0}} - c(E-E_r) + \mathrm{O}\left[(E-E_r)^2\right] \qquad (7.8.6)$$

のように展開してみよう．すると

$$f_l(k) = \frac{1}{k\cot\delta_l - ik} = \frac{1}{k}\frac{1}{[-c(E-E_r)-i]}$$

$$= -\frac{\Gamma/2}{k\left[(E-E_r)+\dfrac{i\Gamma}{2}\right]} \qquad (7.8.7)$$

が導かれる．ここで幅 Γ を

$$\frac{d(\cot\delta_l)}{dE}\Big|_{E=E_r} = -c \equiv -\frac{2}{\Gamma} \qquad (7.8.8)$$

で定義した．Γ は $\cot\delta_l$ が急速に変化すると非常に小さくなることに注意しよう．l 番目の部分波断面積を主に決めるものがただ一つの共鳴であるとき，1準位共鳴の公式（ブライト-ウィグナーの公式）

$$\sigma_l = \frac{4\pi}{k^2}\frac{(2l+1)(\Gamma/2)^2}{(E-E_r)^2+\Gamma^2/4} \qquad (7.8.9)$$

が得られる．共鳴がかなり狭く $1/k^2$ の変化が無視できるとき，Γ はピークが最大値の半分になる共鳴幅（全幅）と見なすことができる．

7.9 同一種類の粒子と散乱

散乱振幅の位相を説明する例として，スピンを持たない2個の同一種類の荷電粒子が，クーロン・ポテンシャル（7.13節で詳しく議論する）によって散乱する場合を考えよう．いま空間部分の波動関数は対称的でなければならないから，

その漸近形は

$$e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}} + e^{-i\boldsymbol{k}\boldsymbol{x}} + [f(\theta) + f(\pi - \theta)]\frac{e^{ikr}}{r} \qquad (7.9.1)$$

のような形であるに違いない．ここで $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}_1 - \boldsymbol{x}_2$ は，粒子 1，2 間の相対位置ベクトルである．この結果，微分断面積は

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta) + f(\pi - \theta)|^2 = |f(\theta)|^2 + |f(\pi - \theta)|^2$$

$$+ \ 2\,\mathrm{Re}[f(\theta)f^*(\pi - \theta)] \qquad (7.9.2)$$

となる．この微分断面積は，$\theta \simeq \pi/2$ で強め合う干渉のために増大する．

これに反しスピン1/2の場合には――偏極していないスピン1/2の粒子線のスピンによらない V を通じてのスピン 1/2 の粒子による散乱を考えると――空間部分が対称的な波動関数のスピン一重項の散乱と，空間部分が反対称的な波動関数のスピン三重項の散乱とがある（6.3節を参照せよ）．もし入射粒子線が偏極していないとすると，スピン一重項には 1/4 の，スピン三重項には 3/4 の統計的重みがかかる．このため

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{4}|f(\theta) + f(\pi - \theta)|^2 + \frac{3}{4}|f(\theta) - f(\pi - \theta)|^2$$

$$= |f(\theta)|^2 + |f(\pi - \theta)|^2 - \mathrm{Re}[f(\theta)f^*(\pi - \theta)] \qquad (7.9.3)$$

となる．すなわち $\theta \simeq \pi/2$ では打消し合う干渉が予想される．実際この効果は観測されている．

7.10　散乱における対称性の考察

ある対称操作の下で，V と H_0 が不変であると仮定する．T の行列要素または散乱振幅 $f(\boldsymbol{k}', \boldsymbol{k})$ に対して，これがどのような意味を持つか考えてみよう．

対称演算子 U がユニタリー的であるとき（たとえば回転とかパリティの場合）すべては簡単である．(7.2.20)で与えられる T の具体的な形を用いると

$$UH_0U^\dagger = H_0\,, \qquad UVU^\dagger = V \tag{7.10.1}$$

は，T もまた U のもとで不変——すなわち

$$UTU^\dagger = T \tag{7.10.2}$$

であることを意味する．ここで

$$|\tilde{\boldsymbol{k}}> \equiv U|\boldsymbol{k}>,\ |\tilde{\boldsymbol{k}}'> \equiv U|\boldsymbol{k}'> \tag{7.10.3}$$

と定義すると

$$<\tilde{\boldsymbol{k}}'|T|\tilde{\boldsymbol{k}}> = <\boldsymbol{k}'|U^\dagger UTU^\dagger U|\boldsymbol{k}> = <\boldsymbol{k}'|T|\boldsymbol{k}> \tag{7.10.4}$$

が成り立つ．

具体例として U がパリティ演算子

$$\pi|\boldsymbol{k}> = |-\boldsymbol{k}>, \qquad \pi|-\boldsymbol{k}> = |\boldsymbol{k}> \tag{7.10.5}$$

を表わす場合を考えよう．パリティのもとで H_0 と V が不変であることは

$$<-\boldsymbol{k}'|T|-\boldsymbol{k}> = <\boldsymbol{k}'|T|\boldsymbol{k}> \tag{7.10.6}$$

を意味する．図式的にいうと図7.13aに示すような散乱の状況である．

部分波の方法を展開したときに，角運動量保存のもたらす結果を利用した．T が $|Elm>$ 表示で対角的なことは，回転のもとで T が不変であることの直接の結果である．$<\boldsymbol{k}'|T|\boldsymbol{k}>$ が図7.13bに示すように，$\boldsymbol{k}$ と $\boldsymbol{k}'$ の相対的配置にのみ依存することにも注目しよう．

対称演算が反ユニタリー的であるとき（時間反転のように）は，もっと慎重にしなければならない．まず，V と H_0 が時間反転のもとで不変である

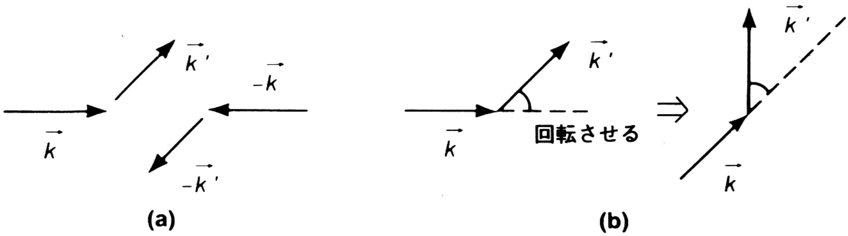


図 7.13. (a) 散乱 $\boldsymbol{k}\to\boldsymbol{k}'$ と $-\boldsymbol{k}\to-\boldsymbol{k}'$ の T 行列の同等性.
(b) 回転の下での T 行列の同等性.

と要請すると

$$\Theta T\Theta^{-1} = T^{\dagger} \tag{7.10.7}$$

となることに注意しよう．これは反ユニタリー演算子が(7.2.20)の中で

$$\frac{1}{E-H_0+i\varepsilon} \quad \text{を} \quad \frac{1}{E-H_0-i\varepsilon} \quad \text{へ} \tag{7.10.8}$$

変化させるからである．反ユニタリー演算子に対しては

$$<\beta|\alpha> = <\tilde{\alpha}|\tilde{\beta}>, \tag{7.10.9}$$

$$|\tilde{\alpha}> \equiv \Theta|\alpha>, \qquad |\tilde{\beta}> \equiv \Theta|\beta> \tag{7.10.10}$$

であることも思い出そう．ここで

$$|\alpha> = T|\boldsymbol{k}>, \qquad <\beta| = <\boldsymbol{k}'| \tag{7.10.11}$$

を考えると

$$\begin{aligned} |\tilde{\alpha}> &= \Theta T|\boldsymbol{k}> = \Theta T\Theta^{-1}\Theta|\boldsymbol{k}> = T^{\dagger}|-\boldsymbol{k}>, \\ |\tilde{\beta}> &= \Theta|\boldsymbol{k}'> = |-\boldsymbol{k}'> \end{aligned} \tag{7.10.12}$$

であるから，(7.10.9)は

$$<\boldsymbol{k}'|T|\boldsymbol{k}> = <-\boldsymbol{k}|T|-\boldsymbol{k}'> \tag{7.10.13}$$

となる．始状態と終状態の運動量が入れ代り，また運動量の向きも逆転していることに注目しよう．

時間反転の要請［(7.10.13)］とパリティの要請［(7.10.6)］を組み合せると興味深い結果が得られる：

$$<\boldsymbol{k}'|T|\boldsymbol{k}> \overset{\Theta\text{の下で}}{=} <-\boldsymbol{k}|T|-\boldsymbol{k}'> \overset{\pi\text{の下で}}{=} <\boldsymbol{k}|T|\boldsymbol{k}'> \tag{7.10.14}$$

となるので(7.2.19)により

$$f(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{k}') = f(\boldsymbol{k}', \boldsymbol{k}) \tag{7.10.15}$$

が成り立つ．その結果

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(\boldsymbol{k}\to\boldsymbol{k}') = \frac{d\sigma}{d\Omega}(\boldsymbol{k}'\to\boldsymbol{k}) \tag{7.10.16}$$

となる．この式は**詳細つりあい**の式と呼ばれている．

(7.10.14)と類似な式を，スピンがある場合に検討するとさらに興味深い．このとき初期の自由粒子ケットは $|\boldsymbol{k}, m_s>$ で表わすことができる．時間反転の部分に(4.4.79)を利用すると

$$\begin{aligned} <\boldsymbol{k}', m'_s|T|\boldsymbol{k}, m_s> &= i^{-2m_s+2m'_s} <-\boldsymbol{k}, -m_s|T|-\boldsymbol{k}', -m'_s> \\ &= i^{-2m_s+2m'_s} <\boldsymbol{k}, -m_s|T|\boldsymbol{k}', -m'_s> \end{aligned} \tag{7.10.17}$$

が得られる．初期状態が偏極していないときは，初期スピン状態に関して和をとり(2s+1)で割る．終状態での偏極を観測しないときは終状態に関する和をとらなければならない，すると詳細つりあいの式として

$$\overline{\frac{d\sigma}{d\Omega}}(\boldsymbol{k}\to\boldsymbol{k}') = \overline{\frac{d\sigma}{d\Omega}}(\boldsymbol{k}'\to\boldsymbol{k}) \tag{7.10.18}$$

の形が得られる．(7.10.18)の中で $d\sigma/d\Omega$ の上にある横線は，初めのスピン

状態に関し，平均して終りのスピン状態に関して和をとることを意味している．

7.11　時間を含む散乱の定式化

散乱に関するいままでの議論は，時間を含まない定式化に基づいていた．時間に依存するシュレーディンガー方程式を基にして散乱理論を展開することも可能である．この定式化も，(7.1.6)と同じリップマン-シュウィンガー方程式を導くことを示そう．

時間を含む定式化では散乱過程を，自由粒子ケットからポテンシャル V の存在によって影響を受けた状態ケットへの，状態ケットの変化と考える．基本的な運動方程式は，$|\psi;t\rangle$ を V があるときの時間に依存するシュレーディンガー表示のケットとして

$$\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t}-H_0\right)|\psi;t\rangle = V|\psi;t\rangle \tag{7.11.1}$$

である．散乱問題に適する境界条件は，遠い過去 $(t\to-\infty)$ で粒子が自由であることである．この要請はポテンシャルを断熱的に——すなわち非常にゆっくりと——5.8節で示したように

$$V\to\lim_{\eta\to0}Ve^{\eta t} \tag{7.11.2}$$

に従って入れれば自動的に実現される．非斉次項のある偏微分方程式がグリーン関数［(7.1.18)を参照］を導入して解けるように，演算子を含むシュレーディンガー方程式 (7.11.1)は

$$\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t}-H_0\right)G_+(t,t')=\delta(t-t') \tag{7.11.3}$$

を満足するグリーン演算子 $G_+(t,t')$ を導入することによって解ける，G_+ に課す因果律の要請は，t' での粒子の相互作用が $t>t'$ に対してのみ影響を持つことである．そこで遅延境界条件

$$G_+(t, t') = 0, \quad t<t' \text{ に対して} \tag{7.11.4}$$

を課す．(7.11.3)と(7.11.4)の解は

$$G_+(t, t') = -\frac{i}{\hbar}\theta(t-t')\, e^{-iH_0(t-t')/\hbar} \tag{7.11.5}$$

で与えられる．$t>t'$ のときは右辺の δ-関数はきかないから，$e^{-iH_0(t-t')/\hbar}$ に定数をかけたものは明らかに(7.11.3)の微分方程式を満足する．$t<t'$ のときはこの $G_+(t, t')$ は恒等的にゼロなので，要求されている(7.11.4)の条件を明らかに満たしている．$t=t'$ では θ-関数の不連続性による特別の寄与があり，これが(7.11.3)の右辺とつり合うことに着目する：

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left[-\frac{i}{\hbar}\theta(t-t')\right] = \delta(t-t') . \tag{7.11.6}$$

そこで，もとの問題の解を次のように表わすことができる：

$$|\psi^{(+)}; t> = |\phi; t> + \int_{-\infty}^{\infty} G_+(t, t') V |\psi^{(+)}; t'> dt' . \tag{7.11.7}$$

ここで

$$\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - H_0\right)|\phi; t> = 0 \tag{7.11.8}$$

であり，(7.11.7)中の積分の上限は $t'>t$ に対して G_+ がゼロなので t と置いてもよい．$t\to-\infty$ のとき，要請通り $|\psi^{(+)}; t>$ は $|\phi; t>$ と一致する．これは t' が任意の有限な値をとるとき，$t\to-\infty$ とすれば $G_+(t, t')$ がゼロになるからである．(7.11.7)が t を含むシュレーディンガー方程式(7.11.1)を満足することを見るには，単に演算子 $[i\hbar(\partial/\partial t)-H_0]$ を $|\psi^{(+)}; t>$ にかければよい．ケット $|\phi; t>$ からの寄与はない．第2項への効果を見ると，$[i\hbar(\partial/\partial t)-H_0]$ が G_+ にかかると $\delta(t-t')$ となるので，積分計算の結果ただちに $V|\psi^{(+)}; t>$ が得られる．

ここまでのところでは，$|\psi^{(+)};t\rangle$ がエネルギー固有ケットであることさえ要請してこなかった．固有ケットとすると，いつものように時間依存性を分離できる：

$$|\phi;t\rangle=|\phi\rangle e^{-iEt/\hbar}$$
$$|\psi;t\rangle=|\psi\rangle e^{-iEt/\hbar} \tag{7.11.9}$$

ここには暗黙の仮定があり，V を(7.11.2)のように断熱的に入れるとき E は変化しないとしている．等式(7.11.5)と(7.11.7)を $t=0$ で用いると

$$|\psi^{(+)}\rangle=|\phi\rangle-\frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{0}dt'\,e^{iH_0t'/\hbar}\,e^{-iEt'/\hbar}\,V|\psi^{(+)}\rangle \tag{7.11.10}$$

が得られる．この積分は無限に振動しているように見えるかもしれない．しかし V が実際には $Ve^{\eta t}$ と解釈されるべきことを思い出そう．その結果，時間積分は直ちに実行できて

$$\begin{aligned}|\psi^{(+)}\rangle&=|\phi\rangle-\frac{i}{\hbar}\lim_{t''\to-\infty}\int_{t''}^{0}dt'\,e^{i(H_0-E-i\eta\hbar)t'/\hbar}\,V|\psi^{(+)}\rangle\\&=|\phi\rangle-\frac{1}{H_0-E-i\eta\hbar}\left[1-\lim_{t''\to-\infty}e^{[i(H_0-E)/\hbar+\eta]t''}\right]V|\psi^{(+)}\rangle\end{aligned} \tag{7.11.11}$$

が得られる．$t''\to-\infty$ とすると，これはまさに(7.1.6)のリップマン-シュウィンガー方程式である．

読者はこの二つの定式化を比較して，$i\varepsilon$ をつけるという処方がどのように現われたのかを注意深く観察して欲しい．以前，時間を含まない定式化をしたときに $i\varepsilon$-項の正の符号を選んだのは，散乱体が外向き球面波にのみ影響を与えることに対応づけたからであった（7.1節を参照）．ここで述べた時間を含む定式化で(7.11.11)中に $i\varepsilon(\varepsilon=\eta\hbar)$ があるのは，粒子が遠い過去で自由粒子であったという要請からである．

ポテンシャル(7.11.2)をゆっくりと入れるのは我々の基本的仮定であるが，少し人工的でないかと思われるかもしれない．だが散乱を記述するのに，波束による定式化を用いたとしてみよう．波束がポテンシャルの働く領域の十分外にある限り，ポテンシャルがゼロであろうと有限であろうと，大したことでない．とりわけ V は遠い過去でゼロであってもよく，それでも困難は生じない．

時間を含む摂動論との関連

散乱を議論するのに，時間に依存するシュレーディンガー方程式(7.11.1)に基づいた時間を含む定式化を用いることができるから，(7.11.1)に基づいた近似法が適用できるに違いない．なかでも以前5.6節で発展させた時間を含む摂動論を，散乱問題に展開することができるに違いない．もちろんそれには，ポテンシャルがある意味で弱いと見なせることを仮定している．

第一に $d\sigma/d\Omega$ を計算するのに，黄金則がどのように応用できるかを示そう．そして7.2節のボルン近似による結果を導く．

遠い過去で状態ケットが運動量固有ケット $|\boldsymbol{k}\rangle$ によって表わされていると仮定する．相互作用が(7.11.2)のようにゆっくりとかけられると，$|\boldsymbol{k}\rangle$ 以外の運動量固有ケット——例えば $|\boldsymbol{k}'\rangle$——にも状態が分布することになる．以前見たように（5.6節参照），遷移確率は（摂動の1次まで）次のように計算できる．まず

$$\langle \boldsymbol{k}'|U_I^{(1)}(t,-\infty)|\boldsymbol{k}\rangle = -\frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{t}\langle \boldsymbol{k}'|V_I(t')|\boldsymbol{k}\rangle dt' \qquad (7.11.12)$$

と表わす．ここで $V_I(t')=e^{iH_0t'/\hbar}Ve^{-iH_0t'/\hbar}e^{\eta t'}$ および $E=\hbar^2k^2/2m$ である．すると時刻 t に $|\boldsymbol{k}'\rangle$ を見出す遷移確率は

$$|\langle \boldsymbol{k}'|U_I^{(1)}(t,-\infty)|\boldsymbol{k}\rangle|^2 = \frac{|\langle \boldsymbol{k}'|V|\boldsymbol{k}\rangle|^2}{\hbar^2}\frac{e^{2\eta t}}{[(E_k-E_{k'})^2/\hbar^2+\eta^2]}$$

(7.11.13)

となる．$\eta \to 0$（t は有限）としたときの遷移率は，まさに黄金則から期待される通りである：

$$\frac{d}{dt}\,|<\boldsymbol{k}'|\,U_I^{(1)}(t,\,-\infty)|\boldsymbol{k}>|^2 = \frac{2\pi}{\hbar}\,|<\boldsymbol{k}'|\,V\,|\boldsymbol{k}>|^2\,\delta(E_k - E_{k'}). \tag{7.11.14}$$

ここで(5.8.5)を用いた．(7.11.14)の右辺は t に依らないことに注意しよう．

ここで平面波の状態に対して通常用いられる規格化についてまとめておくことが重要である．1.7節で δ-関数を用いた規格化

$$<\boldsymbol{k}'|\boldsymbol{k}> = \delta^{(3)}(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}') \tag{7.11.15}$$

を用いた．すると完備関係式は

$$1 = \int d^3k|\boldsymbol{k}><\boldsymbol{k}| \tag{7.11.16}$$

のように表わせる．t を含む摂動論を散乱過程に応用するときは，箱の中での規格化

$$<\boldsymbol{k}'|\boldsymbol{k}> = \delta_{\boldsymbol{k}',\boldsymbol{k}} \tag{7.11.17}$$

を用いる方が便利である．このとき $\boldsymbol{k}$ として許される値は

$$k_{x,y,z} = \frac{2\pi\, n_{x,y,z}}{L} \tag{7.11.18}$$

で与えられる．波動関数は $[1/(2\pi)^{3/2}]e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}$ ではなくて

$$<\boldsymbol{x}|\boldsymbol{k}> = \frac{1}{L^{3/2}}\,e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}} \tag{7.11.19}$$

で与えられる．完備関係式は

$$1 = \sum_{\boldsymbol{k}} |\boldsymbol{k}><\boldsymbol{k}| \tag{7.11.20}$$

であるが，非常に大きな箱に対しては変数 $k_{x,y,z}$ を連続にしてもよく，そのときは

$$1 = \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \int d^3k |\boldsymbol{k}><\boldsymbol{k}| \qquad (7.11.21)$$

のように表わせる．これは(7.11.16)と似ているが，$(L/2\pi)^3$ がついている．δ-関数による規格化を用いた式から箱での規格化を用いた式に移るための非常に便利な関係式は

$$(2\pi)^3<\boldsymbol{k}'|V|\boldsymbol{k}>_{\delta\text{-関数による規格化}} = L^3<\boldsymbol{k}'|V|\boldsymbol{k}>_{\text{箱での規格化}} \qquad (7.11.22)$$

である．読者はこの式を，状態の完全系を位置座標表示で挿入することによって容易に確かめられるであろう．

箱での規格化は状態密度を算出するのに大変便利である．このためにこれは，時間を含む摂動論に基づいて散乱を扱う際によく用いられる．立体角 $d\Omega$ 内への散乱を求めるとき，この規格化では状態密度を表わすための式が

$$n^2\, dn d\Omega = \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \frac{km}{\hbar^2}\, dE d\Omega \qquad (7.11.23)$$

となる［(5.7.31)を見よ］．

散乱の問題に戻り，$|\boldsymbol{k}>$ から立体角要素 $d\Omega$ 内にある一群の状態 $|\boldsymbol{k}'>$ への遷移率 w を考える．黄金則(5.6.34)と(7.11.14)から w は（弾性散乱 $k' = k$ に対して）

$$w = \frac{2\pi}{\hbar} |<\boldsymbol{k}'|V|\boldsymbol{k}>|^2 \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \frac{km}{\hbar^2}\, d\Omega \qquad (7.11.24)$$

で与えられる．これはちょうど

$$(\text{入射流束}) \times \frac{d\sigma}{d\Omega}\, d\Omega \qquad (7.11.25)$$

$\mathrm{Im}(\psi^* \nabla \psi)$ から]

$$|\boldsymbol{j}| = \frac{\hbar}{m}\left|\mathrm{Im}\left(\frac{e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}}{L^{3/2}}\nabla\frac{e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}}{L^{3/2}}\right)\right| = \frac{\hbar k}{mL^3} \tag{7.11.26}$$

のように得られる．あるいは，(入射流束) = (速度)/(体積) = $\hbar k/mL^3$ である．以上をまとめると

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{mL^3}{\hbar k}\right)\left(\frac{2\pi}{\hbar}\right)\left(\frac{L}{2\pi}\right)^3\left(\frac{km}{\hbar^2}\right)\left|\frac{1}{L^3}\int d^3x V(\boldsymbol{x})\,e^{i(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')\cdot\boldsymbol{x}}\right|^2$$

$$= \left|\frac{1}{4\pi}\frac{2m}{\hbar^2}\int d^3x\ V(\boldsymbol{x})\,e^{i(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')\cdot\boldsymbol{x}}\right|^2 \tag{7.11.27}$$

となる．これはまさしく第1ボルン近似の結果［(7.2.22)］である．同じようにして高次のボルン近似項も得られる．

この節で述べたことをまとめてみよう．時間依存性のあるシュレーディンガー方程式［(7.11.1)］に基づく時間を含む定式化によって，以前に時間を含まない定式化を用いて得た結果——リップマン-シュウィンガー方程式，ボルン近似など——が容易に導けた．さらに時間を含む定式化は，弾性散乱よりもっと一般的な反応過程を議論するのに，より適していることが分かる．この点を説明する具体的な例として，次に原子による電子の非弾性散乱の議論に移ろう．

7.12　非弾性電子-原子散乱

電子線と基底状態にある原子との相互作用を考察しよう．入射電子が弾性的に散乱され，散乱後の原子は励起されない場合がある：

$$e^- + \text{原子(基底状態)} \rightarrow e^- + \text{原子(基底状態)}. \tag{7.12.1}$$

これは弾性散乱の例である．原子が無限に重いと見なされるならば，電子の運動エネルギーは変化しない．一方，標的の原子が励起されることも可能である：

$$e^- + \text{原子(基底状態)} \rightarrow e^- + \text{原子(励起状態)}. \tag{7.12.2}$$

この場合，散乱後出ていく電子の運動エネルギーは散乱前の入射電子のエネルギーより小さく，その差は標的の原子を励起するのに使われるから**非弾性散乱**という．

電子と原子系の初期ケットは

$$|\boldsymbol{k},\ 0> \tag{7.12.3}$$

と表わせる．ここで $\boldsymbol{k}$ は入射電子の波数ベクトルで，0 は原子の基底状態を表わす．厳密にいえば(7.12.3)は，入射電子ケット $|\boldsymbol{k}>$ と基底状態原子ケット $|0>$ との直積として理解しなくてはならない．これに対応する波動関数は

$$\frac{1}{L^{3/2}} e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}} \psi_0(\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \cdots\cdots, \boldsymbol{x}_z) \tag{7.12.4}$$

であり，ここで平面波に対して箱の中での規格化を用いた［訳註：$\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \cdots\cdots, \boldsymbol{x}_z$ は原子内電子の座標］．

終状態の電子としてある決まった波数ベクトル $\boldsymbol{k}'$ を持ったものに注目する．終状態ケットとそれに対応する波動関数は

$$|\boldsymbol{k}', n> \quad \text{および} \quad \frac{1}{L^{3/2}} e^{i\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{x}} \psi_n(\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \cdots\cdots, \boldsymbol{x}_z) \tag{7.12.5}$$

であり，$n = 0$ は弾性散乱に，$n \neq 0$ は非弾性散乱に対応する．

時間を含む摂動論が適用できるとすると，前節のように直ちに微分断面積を書き下すことができる：

$$\begin{aligned}\frac{d\sigma}{d\Omega}(0 \rightarrow n) &= \frac{1}{(\hbar k/m_e L^3)} \frac{2\pi}{\hbar} \left| <\boldsymbol{k}', n| V |\boldsymbol{k},\ 0> \right|^2 \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \left(\frac{k' m_e}{\hbar^2}\right) \\ &= \left(\frac{k'}{k}\right) L^6 \left| \frac{1}{4\pi} \frac{2 m_e}{\hbar^2} <\boldsymbol{k}', n| V |\boldsymbol{k},\ 0> \right|^2.\end{aligned} \tag{7.12.6}$$

L^3 のような項が打消すことも含めすべては以前と似ているが，一つ重要な相異がある：非弾性散乱の場合，$k' \equiv |\boldsymbol{k}'|$ は一般に $k \equiv |\boldsymbol{k}|$ と等しくないのである．

次の課題として，どのような V がこの問題に適当であろうか．入射電子は原点に位置する核と相互作用するが，原子内電子の各々とも相互作用することができる．したがって V は

$$V = -\frac{Ze^2}{r} + \sum_i \frac{e^2}{|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}_i|} \tag{7.12.7}$$

と表わせる．入射電子と原子内電子は電子として同一であるから，複雑なことが起きるかもしれない．これを厳密に扱うのは生易しいことでない．幸いにして比較的高速の電子に対しては，この同一性の問題を無視することが容認される．その理由は束縛状態の電子と入射電子との重なりが，運動量空間でわずかしかないからである．行列要素 $<\boldsymbol{k}'n|\,V\,|\boldsymbol{k}\,0>$ を計算する必要があるが，これを具体的に書くと $\boldsymbol{q} \equiv \boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}'$ として

$$<\boldsymbol{k}', n|\,V\,|\boldsymbol{k}, 0> = \frac{1}{L^3}\int d^3x\, e^{i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{x}} < n|\, -\frac{Ze^2}{r} + \sum_i \frac{e^2}{|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}_i|}\,|\,0>$$

$$= \frac{1}{L^3}\int d^3x\, e^{i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{x}} \prod_{i=1}^{z}\int d^3x_i \psi^*{}_n(\boldsymbol{x}_1, \cdots\cdots, \boldsymbol{x}_z)\left[-\frac{Ze^2}{r} + \sum_i \frac{e^2}{|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}_i|}\right]$$

$$\times\, \psi_0(\boldsymbol{x}_1, \cdots\cdots,\ \boldsymbol{x}_z) \tag{7.12.8}$$

である．

この第１項，$-Ze^2/r$（r は実際には $|\boldsymbol{x}|$ を意味する）の行列要素をどのように計算したらよいであろうか．第一に気付くのはこれが入射電子と核の間のポテンシャルであり，原子内電子の座標に依らないことである．そこでこれを(7.12.8)の中の積分

$$\prod^{z} \int d^3x_i$$

の外に出すことができる．残りの部分については，単に

$$\langle n|0\rangle = \delta_{n0} \tag{7.12.9}$$

が得られる．いいかえればこの項は，弾性散乱の場合にのみ寄与する．標的原子は励起されないままである．この弾性散乱の場合に，なお $\boldsymbol{x}$ に関して $e^{i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{x}}/r$ を積分しなければならないが，これはクーロンポテンシャルのフーリエ変換をとることに等しい．7.2節で湯川ポテンシャルのフーリエ変換はすでに計算したので［(7.2.2)と共に(7.2.6)を見よ］，この積分は容易にできる．すなわち

$$\int d^3x\,\frac{e^{i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{x}}}{r} = \lim_{\mu\to 0}\int d^3x\,\frac{e^{i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{x}-\mu r}}{r} = \frac{4\pi}{q^2} \tag{7.12.10}$$

である．(7.12.8)の第2項に関しては，$1/|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_i|$ のフーリエ変換の計算をする．これは座標の変数を $\boldsymbol{x}\to\boldsymbol{x}+\boldsymbol{x}_i$ にずらすと実行でき

$$\sum_i\int\frac{d^3x e^{i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{x}}}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_i|} = \sum_i\int\frac{d^3x\; e^{i\boldsymbol{q}\cdot(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{x}_i)}}{|\boldsymbol{x}|} = \frac{4\pi}{q^2}\sum_i e^{i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{x}_i} \tag{7.12.11}$$

が得られる．これはちょうどクーロンポテンシャルのフーリエ変換に，$\boldsymbol{x}_i$ にある原子内電子による電子密度

$$\rho_{\text{原子}}(\boldsymbol{x}) = \sum_i \delta^{(3)}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_i) \tag{7.12.12}$$

のフーリエ変換をかけたものであることに注意しよう．そこで $|0\rangle$ から $|n\rangle$ への励起に対する形状因子を，慣習上

$$Z\,F_n(\boldsymbol{q}) \equiv \langle n|\sum_{i=1}^{Z} e^{i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{x}_i}|0\rangle \tag{7.12.13}$$

のように定義する．これはさまざまな電子からのコヒーレントな（位相関係がきまっているという点で）寄与により作られている．$n=0$ に対して

は $q \to 0$ のとき

$$\frac{1}{Z} < n \,|\sum_i e^{i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{x}_i}|\, 0 > \to 1$$

であることに注意しよう．すなわち形状因子は弾性散乱の場合，1に近づく．$n \neq 0$（非弾性散乱）に対しては $|n>$ と $|0>$ の直交性により，$q \to 0$ のとき $F_n(\boldsymbol{q}) \to 0$ である．そこで(7.12.8)中の行列要素は

$$\int d^3x\, e^{i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{x}} < n \,|\, -\frac{Ze^2}{r} + \sum_i \frac{e^2}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_i|} \,|\, 0 >$$

$$= \frac{4\pi Ze^2}{q^2}\left[-\delta_{n0} + F_n(\boldsymbol{q})\right] \tag{7.12.14}$$

のように表わせる．

以上により結局，原子による電子の非弾性（または弾性）散乱に対する微分断面積は

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(0 \to n) = \left(\frac{k'}{k}\right) \left| \frac{1}{4\pi} \frac{2m_e}{\hbar^2} \frac{4\pi Ze^2}{q^2} [-\delta_{n0} + F_n(\boldsymbol{q})] \right|^2$$

$$= \frac{4\, m_e^2}{\hbar^4} \frac{(Ze^2)^2}{q^4} \left(\frac{k'}{k}\right) |-\delta_{n0} + F_n(\boldsymbol{q})|^2 \tag{7.12.15}$$

と表わせる．非弾性散乱に対しては δ_{n0} の項は寄与しない．またこのとき微分断面積をボーア半径

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{e^2 m_e} \tag{7.12.16}$$

を用いて

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(0 \to n) = 4\, Z^2 a_0^2 \left(\frac{k'}{k}\right) \frac{1}{(qa_0)^4} |F_n(\boldsymbol{q})|^2 \tag{7.12.17}$$

$$q^2 = |\boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}'|^2 = k^2 + k'^2 - 2\,kk'\cos\theta \qquad (7.12.18)$$

と $dq = -\,d(\cos\theta)kk'/q$ を用いると

$$\frac{d\sigma}{dq} = \frac{2\pi q}{kk'}\frac{d\sigma}{d\Omega} \qquad (7.12.19)$$

と表わせる.

求まった非弾性断面積は，阻止能（stopping power）――荷電粒子が物質中を進むときのエネルギー損失――を議論するのに用いることができる. H. A. ベーテやF. ブロッホを含む多くの人々が，非弾性散乱断面積の観点から阻止能の量子力学的導出を議論している．入射した荷電粒子が単位長さを通過するときの，荷電粒子のエネルギー損失を考察する．単位長さあたりの衝突の割合は，N を単位体積あたりの原子数として $N\sigma$ であり，各々の衝突過程で荷電粒子が失うエネルギーは $E_n - E_0$ である．したがって dE/dx は

$$\begin{aligned}\frac{dE}{dx} &= N\sum_n (E_n - E_0)\int\frac{d\sigma}{dq}(0 \to n)\,dq \\ &= N\sum_n (E_n - E_0)\frac{4Z^2}{{a_0}^2}\int_{q_{\min}}^{q_{\max}}\frac{k'}{k}\frac{1}{q^4}\frac{2\pi q}{kk'}|F_n(\boldsymbol{q})|^2 dq \\ &= \frac{8\pi N}{k^2{a_0}^2}\sum_n (E_n - E_0)\int_{q_{\min}}^{q_{\max}}\left|\left< n\left|\sum_{i=1}^{Z} e^{i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{x}_i}\right|0\right>\right|^2\frac{dq}{q^3}\end{aligned} \qquad (7.12.20)$$

のように表わせる．(7.12.20)式中の和を計算する方法について，多くの論文が書かれている*．これらの論文の結論は皆，ボーアが1913年に出した阻止能の公式

$$\frac{dE}{dx} = \frac{4\pi NZe^4}{m_e v^2}\ln\left(\frac{2\,m_e v^2}{I}\right) \qquad (7.12.21)$$

* 比較的初歩的な議論については，K. Gottfried (1966) および H. A. Bethe and R. W. Jackiw (1968) を見よ.

を量子力学的に正当化している．この式の I は，平均励起エネルギー $\langle E_n - E_0 \rangle$ に関連した半経験的パラメータである．荷電粒子の電荷が $\pm ze$ のときは，単に Ze^4 を z^2Ze^4 で置きかえればよい．また入射粒子が電子でない場合にも，(7.12.21)中に現われる m_e はやはり電子の質量で，荷電粒子の質量ではないことに注意するのは重要である．つまりエネルギー損失は，入射粒子の電荷と速度によるが，入射粒子の質量にはよらない．これは荷電粒子の検出に応用する上で，重要である．

量子力学的に見ると，荷電粒子のエネルギー損失は，一連の非弾性散乱過程である．荷電粒子と原子とが相互作用するごとに，荷電粒子に対して位置の"観測"がされていると考えてよい．霧箱や原子核乾板のような媒質の中で，粒子の軌跡がなぜほぼ直線なのか不思議に思える．その理由は微分断面積(7.12.17)が小さい q のところで鋭い山を作るからである．大きな q に対して(7.12.17)の中の q^{-4} や $F_n(\boldsymbol{q})$ は急速にゼロになるので，散乱後の運動量の方向は，入射電子とほとんど同じである．

核形状因子

非弾性散乱による原子の励起は，10^9cm^{-1} から 10^{10}cm^{-1} ほどの q に対して重要である．q が非常に大きいとすると，$F_0(\boldsymbol{q})$ や $F_n(\boldsymbol{q})$ からの寄与は急速に減少する．極端に大きな q で大きさの程度が $1/R_{\text{核}} \sim 10^{12}\text{cm}^{-1}$ ほどになると，原子核の構造が重要になってくる．点状の核によるクーロンポテンシャルは，この場合拡がった物体によるクーロンポテンシャルで置き換えなければならない：

$$-\frac{Ze^2}{r} \to -Ze^2 \int \frac{d^3x' N(r')}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|} \tag{7.12.22}$$

ここで $N(r)$ は

$$\int d^3x' N(r') = 1 \tag{7.12.23}$$

になるように規格化した核電荷分布である．すると点状の核は

$$N(r') = \delta^{(3)}(r') \qquad (7.12.24)$$

である特別な場合と見なすことができる．(7.12.22)の右辺のフーリエ変換は，(7.12.10)との類似で

$$Ze^2 \int d^3x \int \frac{d^3x' e^{i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{x}} N(r')}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|}$$

$$= Ze^2 \int d^3x'\, e^{i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{x}'}\, N(r') \int \frac{d^3x e^{i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{x}}}{r}$$

$$= Ze^2 \frac{4\pi}{q^2} F_{核}(\boldsymbol{q}) \qquad (7.12.25)$$

のように計算できる．上式の最初の変形で座標を $\boldsymbol{x} \to \boldsymbol{x} + \boldsymbol{x}'$ にずらした．また

$$F_{核}(\boldsymbol{q}) \equiv \int d^3x\, e^{i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{x}}\, N(r) \qquad (7.12.26)$$

を定義した．こうして核の大きさが有限であることに起因する，ラザフォードの公式からのずれが

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{ラザフォード} \cdot |F_{核}(\boldsymbol{q})|^2 \qquad (7.12.27)$$

の形に求められる．ここで $(d\sigma/d\Omega)_{ラザフォード}$ は，電荷 $Z|e|$ の点状の核による電子の電気的散乱の微分断面積である．q が小さいときは

$$F_{核}(\boldsymbol{q}) = \int d^3x\,(1 + i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{x} - \frac{1}{2}q^2r^2(\hat{\boldsymbol{q}}\cdot\hat{\boldsymbol{r}})^2 + \cdots\cdots)N(r)$$

$$= 1 - \frac{1}{6}q^2\langle r^2\rangle_{核} + \cdots\cdots \qquad (7.12.28)$$

である．球対称性から $\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{x}$ の項は消える．また q^2 の項では $\cos^2\theta$（θ は $\hat{\boldsymbol{q}}$ と $\hat{\boldsymbol{r}}$ の間の角度）の角度平均はちょうど1/3であること，すなわち

$$\frac{1}{2}\int_{-1}^{1} d(\cos\theta)\cos^2\theta = \frac{1}{3} \qquad (7.12.29)$$

を用いている．$\langle r^2\rangle_{核}$ という量は，核の平均２乗半径と呼ばれている．このようにして核の寸法や陽子の寸法も，R. ホフスタッターと協力者が実行したように“測定”することができる．陽子の場合には，スピン（磁気モーメント）の効果も同様に重要である．

7.13　クーロン散乱 †(訳注653頁参照)

この最後の節は桜井教授によって，予備的な形にさえも書かれていなかった．しかしこのテーマは彼が現代の量子力学に書こうとしていた項目のリストの中にあがっていた．ジョンズ・ホプキンス大学のトーマス・フルトン教授は，桜井教授を追悼してこの節のためにクーロン散乱に関する自分の講義ノートを寄稿することを，親切に申し出て下さった．編者はこの友情のしるしに深く感謝している．しかし読者は，この節が本書の他の部分と較べて文体も記号も異なっている所があるのを注意する必要がある*.

クーロン相互作用のハミルトニアンの散乱解

電荷 Z_1e と $-Z_2e$ を持つ粒子間の衝突を扱うため，クーロンポテンシャル

$$V(r) = \frac{-Z_1Z_2e^2}{r} \qquad (7.13.1)$$

を含む３次元のシュレーディンガー方程式

---

* この内容の多くは，Gottfried の取扱い（Gottfried, 1966, pp.148-153）をやや拡張したものであって，彼の教科書と同じ記号を用いている．クーロンの部分波の扱いには，工夫がしてある．ラプラス変換の積分を計算する前に，漸近形を直接扱うので，通常の処方より簡潔になっている．

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2-\frac{Z_1Z_2e^2}{r}\right)\psi(\boldsymbol{r})=E\psi(\boldsymbol{r}),\qquad E>0 \qquad (7.13.2\mathrm{a})$$

すなわち

$$\left(\nabla^2+k^2+\frac{2\gamma k}{r}\right)\psi(\boldsymbol{r})=0 \qquad (7.13.2\mathrm{b})$$

から出発しよう．ここで m は Z_1e と $-Z_2e$ の粒子に対する換算質量 $m=m_1m_2/(m_1+m_2)$ である．(7.13.2b)中の γk は

$$\gamma k=\frac{Z_1Z_2e^2m}{\hbar^2}\quad \text{すなわち} \quad \gamma=\frac{Z_1Z_2e^2}{\hbar v}=\frac{\alpha Z_1Z_2c}{v}, \qquad (7.13.3)$$

$$\alpha=\frac{e^2}{\hbar c}=\frac{1}{137.03608}$$

で与えられる．$\gamma>0$ は引力に対応することに注意しよう．純粋なクーロン場を扱う限り，(7.13.2)の解 $\psi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r})$ を

$$\psi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r})=e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}\,\chi(u)$$

$$u=ikr(1-\cos\theta)=ik(r-z)=ikw \qquad (7.13.4)$$

$$\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}=kz$$

のように書くことが可能である．(7.13.4)中の $\psi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r})$ に対する変数の分離は，次の点を認めると納得できる：(1) 問題は軸対称であるから，解に方位角 ϕ は含まれない．(2) $\psi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r})$ はクーロン場の完全な波動関数（入射波と散乱波の和）を表わすので，$e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}$ と $r^{-1}e^{ikr}$ を主要な漸近形に含むいくつかの項が存在するに違いない．実際にそうなっていることを，いまから独立変数を選んですぐに証明しよう［等式(7.13.9a)，(7.13.13)および(7.13.14)を参照]．（このような変数の特別な選び方についてはGottfried 1966，p.148にもう一つの議論がある．）

独立変数 (z, w, λ) を選ぶ．$w = r - z$ であり λ は ϕ にとることもできるが，ϕ に解 $\psi_k(\boldsymbol{r})$ は依存しない．直交座標 (x, y, z) を (z, w, λ) に変更するには，例えば

$$\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial w}{\partial x}\frac{\partial}{\partial w} + \frac{\partial z}{\partial x}\frac{\partial}{\partial z} + \frac{\partial \lambda}{\partial x}\frac{\partial}{\partial \lambda}$$

$$= \frac{x}{r}\frac{\partial}{\partial w} + \frac{\partial \lambda}{\partial x}\frac{\partial}{\partial \lambda} \qquad (7.13.5)$$

のような表式を用いる．$e^{ikz}\chi(u)$ は λ と独立なので，演算 $\partial/\partial\lambda$ は何の寄与もしないことに注意する．$e^{ikz}\chi(u)$ に対する演算は

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} = \frac{x^2}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial w^2} + \left(\frac{1}{r} - \frac{x^2}{r^3}\right)\frac{\partial}{\partial w},$$

$$\frac{\partial^2}{\partial y^2} = \frac{y^2}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial w^2} + \left(\frac{1}{r} - \frac{y^2}{r^3}\right)\frac{\partial}{\partial w},$$

$$\frac{\partial^2}{\partial z^2} = \frac{w^2}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial w^2} + \left(\frac{w}{r^2} - \frac{w^3}{r^3}\right)\frac{\partial}{\partial w} - \frac{2w}{r}\frac{\partial^2}{\partial z \partial w}$$

$$+ \frac{w}{r^2}\frac{\partial}{\partial w} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \qquad (7.13.6)$$

のようになることが，容易に確かめられるであろう．(7.13.4)—(7.13.6)を(7.13.2)の中で用いると

$$\left[u\frac{d^2}{du^2} + (1 - u)\frac{d}{du} - i\gamma\right]\chi(u) = 0 \qquad (7.13.7)$$

が得られる．

(7.13.7)の解を求める第一の試みとして，漸近形——すなわち大きな $r-z$ に対する解を考える．($\theta = 0$ では $r - z = r(1 - \cos\theta) = 0$ であるから，これは方向が大きくそれる場合である)．2 種類の解，(1) $\chi \sim u^\lambda$ および(2)

$\chi \sim e^u$ を試みよう.

第一の型の解であるとすると

$$(-\lambda - i\gamma)\, u^{\lambda} \simeq 0, \quad \text{すなわち} \quad \lambda = -i\gamma \tag{7.13.8}$$

が要請される. したがって

$$\chi(u) \sim u^{-i\gamma} \sim e^{-i\gamma \ln k(r-z)} \tag{7.13.9a}$$

$$\psi_k(\boldsymbol{r}) \sim e^{i[\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r} - \gamma \ln k(r-z)]} \tag{7.13.9b}$$

となる. 等式(7.13.9b)は明らかに入射平面波の部分を表わしている. 第2の型の解 $\chi \sim e^u$ は明らかに $u(d^2\chi/du^2) - u(d\chi/du) = 0$ を満足する. そこでこれをヒントに二つの型の解の特徴を積の形で兼ね備えた

$$\chi(u) \sim u^{\lambda} e^u \tag{7.13.10}$$

を試みの解として(7.13.7)に代入する. $u^{\lambda+1} e^u$ の係数は明らかにゼロであるが, $u^{\lambda} e^u$ の項の係数から

$$2\lambda + (1-\lambda) - i\gamma = 0, \quad \text{すなわち} \quad \lambda = -1 + i\gamma \tag{7.13.11}$$

という関係式が導かれる. したがって

$$\chi(u) \simeq \frac{u^{i\gamma} e^u}{u} \simeq \frac{e^{ik(r-z)}}{k(r-z)} e^{i\gamma \ln k(r-z)} \tag{7.13.12}$$

および

$$\psi(\boldsymbol{r}) \sim \frac{e^{i[kr + \gamma \ln k(r-z)]}}{r-z} \tag{7.13.13}$$

となり, 明らかに外向球面波を表わしている. (7.13.9b)と(7.13.13)で与えられた二つの解の断片を線形結合し, $r - z = r(1-\cos\theta) = 2r\sin^2(\theta/2)$ および $\ln[2kr\sin^2(\theta/2)] = \ln 2kr + 2\ln\sin(\theta/2)$ を用いると, 規格化された波動

関数を

$$\psi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}) \underset{|u|\to\infty}{\to} \frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\left\{ e^{i[\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-\gamma\ln(kr-\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r})]} + \frac{f_C(k,\ \theta)\, e^{i[kr+\gamma\ln 2kr]}}{r} \right\} \quad (7.13.14)$$

のように書き表わすことができる．遠方の r では余分の位相効果があるが，これはクーロン相互作用が遠方まで到達するためである．

次にクーロン散乱振幅 $f_C(k,\ \theta)$ を求めなければならない．興味あることに γ/k の因子は別にして，その大きさは，(7.13.13)の漸近形の中にある $r-z$ から得られ $1/(2\sin^2\theta/2)$ である．しかし，これを得るのはなかなか大変である．ここに詳しく述べる計算が困難に思える場合は，はじめて読むときは最後の結果のみに集中して読むことを勧めたい．

微分方程式(7.13.7)に戻ろう．微分方程式の理論によれば，u-平面の有限領域内にある唯一の特異点は $u = 0$ にある*．(我々の欲しい解は $u = 0$ で正則な解である．) $\chi(u)$ をラプラス変換した空間 t で調べよう：

$$\chi(u) = \int_{t_1}^{t_2} e^{ut} f(t)dt\ . \quad (7.13.15)$$

ここで複素 t-平面内の $t_1 \to t_2$ の積分路は，後になってから定める．(7.13.15)で与えられた $\chi(u)$ を(7.13.7)に代入すると，部分積分の結果

$$\int_{t_1}^{t_2} [ut^2 + (1-u)t - i\gamma] f(t)\, e^{ut}\, dt$$

$$= \int_{t_1}^{t_2} f(t) \left[(t-i\gamma) + t(t-1)\frac{d}{dt} \right] e^{ut}\, dt$$

$$= t(t-1)\, e^{ut} f(t)\, \Big|_{t_1}^{t_2} + \int_{t_1}^{t_2} \{ (t-i\gamma) f(t)$$

$$- \frac{d}{dt}[t(t-1)f(t)] \} e^{ut}\, dt = 0 \quad (7.13.16)$$

---

* 数学的背景に関しては，E. T. Whittaker and G. N. Watson, *A Course of Modern Analysis*, 4 th ed. (Cambridge, London: 1935)，Chapter XVI. を参照せよ．

が得られる．表面項（surface term）がゼロになると仮定すると，明らかに

$$(t-i\gamma)f(t)-\frac{d}{dt}[(t-1)tf(t)]=0 \qquad (7.13.17)$$

であるから $f(t)$ の解は容易に求められ，A を定数として

$$f(t)=At^{i\gamma-1}(1-t)^{-i\gamma} \qquad (7.13.18)$$

のようになる．中間結果として［(7.13.15)式より］

$$\chi(u)=A\int_C e^{ut}\,t^{i\gamma-1}(1-t)^{-i\gamma}\,dt, \qquad (7.13.19)$$

$$\int_{t_1}^{t_2}\to\int_C$$

が得られた．次に C を選ばなくてはならない．(7.13.19)の被積分関数は，複素 t-平面内の $t=0$ で分岐点を持つ．図7.14参照．(7.13.16)中の表面項がゼロになるためには，端の点で t が $+\infty$ の虚数部を含む必要がある．なぜならば $u=ik(r-z)=ikr(1-\cos\theta)\equiv i\varkappa$ で $\varkappa>0$ だからである．すると

$$e^{ut}=e^{i\varkappa t}\underset{t\to\alpha+i\infty}{\longrightarrow}0$$

となり表面項はゼロになる．しかし $t=\alpha+i\infty$ に到るたくさんの経路がある．図7.14b に示した C の選び方が，実際の計算が示すように［(7.13.24)参照］正しい漸近形を与えるものであるので，この特別な積分路を採用しよう．

$s=ut$ とする．すると(7.13.19)は

$$\chi(u)=A\int_{\bar{C}}\frac{ds}{u}e^{s}\left(\frac{s}{u}\right)^{i\gamma-1}\left(\frac{u-s}{u}\right)^{-i\gamma}$$

$$=A\int_{\bar{C}}ds\,e^{s}\,s^{i\gamma-1}(u-s)^{-i\gamma} \qquad (7.13.20)$$

となり，$\overline{C}$ は図7.15a に描かれている s-平面内の経路である．$\chi(u)$ は $u=0$

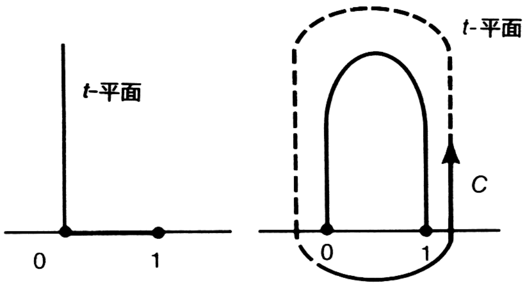


図 7.14.　(a) t-平面内の分岐点 $t=0,\ 1$ と (0, 1) 間の直線的分岐カット．
(b) “ゴム輪のように変形された” (0, 1) 間の分岐カットと (7.13.19) の積分に用いられる積分路 C.

で正則であると要請する．事実，

$$\chi(0)=(-1)^{-i\gamma}A\int_{\bar{C}}\frac{e^s}{s}\,ds=(-1)^{-i\gamma}A\,2\,\pi i \qquad (7.13.21)$$

であるから，正則である．次に(7.13.20)を漸近的極限 $u\to\infty$ において計算し，正しい形が得られることを示す．図7.15b の曲線 C_1 上で固定された s に対して，$s=-(s_0\pm i\varepsilon)$ であり $s/u=-(s_0\pm i\varepsilon)/i\kappa$ であるが，後者は $\kappa\to\infty$ とすると小さい．そこで $(u-s)$ を s/u の級数に展開できる．図7.15b の曲線 C_2 上では $s=-s_0+i(\kappa\pm\varepsilon)$ である．このときは $s/u=1-(s_0\pm i\varepsilon)\ /i\kappa\to 1$ $(\kappa\to\infty)$ であるから s/u の級数展開はできない．だがここで変数を $s\to s'$，$s'=s-u$ に変えると，s'/u に関する展開が可能である．したがって積分 $\overline{C}$ はいま図7.15b に与えられた積分路に置きかわり，さらに $s\to s'$ とすることにより $C_2\to C_1$ となった：

$$\int_{\bar{C}}ds\equiv\int_{C_1}ds+\int_{C_2}ds=\int_{C_1}ds+\int_{C_1}ds' \qquad (7.13.22)$$

$$\uparrow\!_\, s=s'+u$$

および

$$\chi(u)=A\int_{_}\Big\{\ [e^s s^{i\gamma-1}(u-s)^{-i\gamma}]\ ds$$

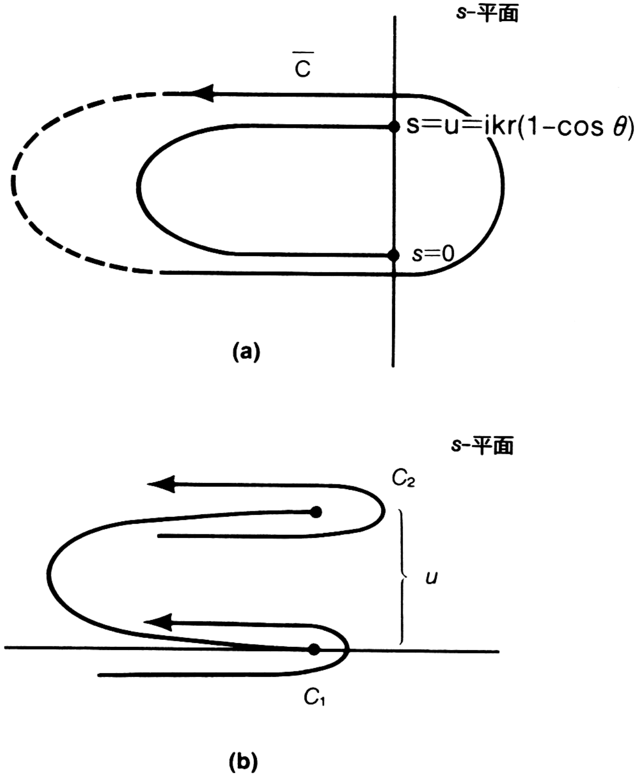


図 7.15. (a) 等式(7.13.20)に用いる s-平面内の積分路 $\overline{C}$.
(b) $\overline{C}$ を C_1 と C_2 にゴム輪状に変形.

$$+\left[\, e^{s'+u}(s'+u)^{i\gamma-1}(-s')^{-i\gamma}\right]ds' \Big\} \qquad (7.13.23)$$

が得られる．ここで $(s'+u)^{i\gamma-1}$ は明らかに s'/u で展開でき——s' は経路 C_1 の上の積分変数で s とも置けるから——(7.13.23)式をさらに簡潔に

$$\chi(u)=A\Big\{\, u^{-i\gamma}\int_{C_1} e^s\, s^{i\gamma-1}\left[\,1-\left(\frac{s}{u}\right)\right]^{-i\gamma} ds$$

$$+\, e^u\, u^{i\gamma-i}(-1)^{-i\gamma}\int_{C_1} e^s\left[\,1+\left(\frac{s}{u}\right)\right]^{i\gamma-1} s^{-i\gamma}ds \Big\} \qquad (7.13.24)$$

と書ける．(7.13.24)中の二つの積分の係数，$u^{-i\gamma}$ と $e^u u^{i\gamma-1}(-1)^{-i\gamma}$ はクーロン散乱に対する正確な漸近形であること［(7.13.9)，(7.13.12)および(7.13.14)を参照］に注目しよう．

(7.13.24)の主要項は $s/u\to 0$ とすると求められ

$$\chi(u)\sim 2\pi iA\left[u^{-i\gamma}g_1(\gamma)-(-u)^{i\gamma-1}e^u g_2(\gamma)\right],$$

$$2\pi i g_1(\gamma)=\int_{C_1}e^s s^{i\gamma-1}\,ds\ , \qquad (7.13.25)$$

$$2\pi i\, g_2(\gamma)=\int_{C_1}e^s s^{-i\gamma}ds$$

となる．$2\pi i g_2(\gamma)$ に対する表式を部分積分すると

$$2\pi i\, g_2(\gamma)=\int_{C_1}e^s s^{-i\gamma}ds=e^s s^{-i\gamma}\Big|_{-\infty-i\epsilon}^{-\infty+i\epsilon}$$

$$-(-i\gamma)\int_{C_1}e^s s^{-i\gamma-1}\,ds$$

$$=i\gamma\, g_1{}^*(\gamma)2\pi i \qquad (7.13.26)$$

である．$-u=u^*$ に注意すると

$$\chi(u)\cong 2\pi i\,Au^{-i\gamma}g_1(\gamma)\left[1+\frac{(u^*)^{+i\gamma}}{u^{-i\gamma}}\frac{g_1{}^*(\gamma)}{g_1(\gamma)}\,i\gamma\,\frac{e^u}{u}\right]$$

$$=2\pi i\,Au^{-i\gamma}g_1(\gamma)\left[1+e^{i\phi(k,u,\gamma)}\,i\gamma\,\frac{e^u}{u}\right] \qquad (7.13.27)$$

と書ける．ここで

$$\frac{(u^*)^{i\gamma}}{u^{-i\gamma}}\cdot\frac{g_1{}^*(\gamma)}{g_1(\gamma)}=\frac{[u^{-i\gamma}g_1(\gamma)]^*}{[u^{-i\gamma}g_1(\gamma)]}=e^{i\phi(k,u,\gamma)} \qquad (7.13.28)$$

と記した．$\gamma\to\infty$ に移るとき［(7.13.4)のように，$i\phi$ をおける］

$$(u^*)^{i\gamma} = (-i)^{i\gamma}[k(r-z)]^{i\gamma} = e^{\gamma\pi/2}\, e^{i\gamma \ln k(r-z)}$$

$$(u)^{-i\gamma} = (i)^{-i\gamma}[k(r-z)]^{-i\gamma} = e^{\gamma\pi/2}\, e^{-i\gamma \ln k(r-z)} \tag{7.13.29}$$

を用いると，規格化された $\psi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r})$ として

$$\psi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}) \sim \frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\left[e^{i[kz-\gamma \ln k(r-z)]} + \frac{g_1{}^*(\gamma)}{g_1(\gamma)} \frac{\gamma}{2k\sin^2(\theta/2)} \times \frac{e^{i[kr+\gamma \ln k(r-z)]}}{r}\right] \tag{7.13.30}$$

が得られる．この式は r と k に依存する位相をはっきりと表わしており，(7.13.14) との比較から

$$f_c(k, \theta) = \frac{\gamma e^{i[\Theta(\gamma)+2\gamma \ln \sin(\theta/2)]}}{2k\sin^2(\theta/2)},$$

$$e^{i\Theta(\gamma)} = \frac{g_1{}^*(\gamma)}{g_1(\gamma)} \tag{7.13.31}$$

と同定される．したがって微分断面積は(7.1.36)を用いて

$$\frac{d\sigma_c(k, \theta)}{d\Omega} = |f_c(k, \theta)|^2 = \frac{\gamma^2}{4k^2\sin^4(\theta/2)} \tag{7.13.32}$$

となる．この γ は(7.13.3)で与えられる．こうして再びラザフォードの公式(7.2.11)が得られた．

熱心な読者のために念のためにハンケルの公式

$$\int_{C_1} e^s s^{-z} ds = \frac{2\pi i}{\Gamma(z)} \tag{7.13.33}$$

を書いておこう．(この式で $z=1$ とすると $\Gamma(1)=0!=1$ が確かめられる．) これより

$$g_1(\gamma) = \frac{1}{\Gamma(1 - i\gamma)}, \qquad e^{i\sigma(\gamma)} = \frac{\Gamma(1 - i\gamma)}{\Gamma(1 + i\gamma)} \tag{7.13.34}$$

が得られる.

クーロン散乱の場合の部分波解析

(7.13.4)と(7.13.19)により $\psi(\boldsymbol{r})$ を

$$\psi(\boldsymbol{r}) = e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}\,\chi(u) = Ae^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} \int_C e^{ut}\, t^{i\gamma-1}(1 - t)^{-i\gamma}\, dt$$

$$= A\int_C e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}\, e^{ik(r-z)t}(1 - t)\, d(t, \gamma)\, dt$$

$$= A\int_C e^{ikrt}\, e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}(1-t)}(1 - t)\, d(t, \gamma)\, dt, \tag{7.13.35}$$

$$d(t, \gamma) \equiv t^{i\gamma-1}(1 - t)^{-i\gamma-1} \tag{7.13.36}$$

のように書きかえることができる. ここで(7.5.18)に類似した平面波の部分波展開を行なうと

$$\psi(\boldsymbol{r}) = \sum_{l=0}^{\infty}(2l + 1)\, i^l\, P_l(\cos\theta)\, A_l(kr), \tag{7.13.37}$$

$$A_l(kr) = A\int_C e^{ikrt}\, j_l[kr(1 - t)](1 - t)\, d(t, \gamma) dt \tag{7.13.38}$$

となる. さて $j_l = \frac{1}{2}(h_l^{(1)} + h_l^{(1)*})$ であり, $h_l^{(1)}$ は球ハンケル関数 $h_l(\rho) = E_l(\rho)e^{i\rho}/\rho$ で（付録 A と Whittaker and Watson, 1935を参照), $E_l(\rho)$ は

l	0	1	2
$E_l(\rho)$	$-i$	$-\left(1 + \frac{i}{\rho}\right)$	$i\left(1 + \frac{3i}{\rho} - \frac{3}{\rho^2}\right)$

(7.13.39)

で与えられる．漸近形は $E_l(\rho)=(-i)^{l+1}+0(\rho^{-1})$ である．そこで

$$A_l(kr)=A_l^{(1)}(kr)+A_l^{(2)}(kr) \tag{7.13.40}$$

と書こう．$A_l^{(1)}$，$A_l^{(2)}$ はそれぞれ h_l，h_l^* からの寄与に対応する．特に

$$\begin{aligned} e^{ikrt}\,e^{ikr(1-t)} &= e^{ikr}, \\ e^{ikrt}\,e^{-ikr(1-t)} &= e^{-ikr}e^{2ikrt} \end{aligned} \tag{7.13.41}$$

であるから

$$A_l^{(1)}(kr)=\frac{Ae^{ikr}}{2\,kr}\int_C E_l[kr(1-t)]d(t,\gamma)dt \tag{7.13.42}$$

である．$|t|$ が大きいとき $d(t,\gamma)\sim t^{-2}$ で $E_l\sim t^0\sim 1$ である．また t-平面の特異点は $t=0$，1の分岐点と，E_l の変数 $kr(1-t)$ がゼロになるとき起こりうる極だけであるから，積分路 C を図7.14b に示すように閉じる．複素平面の単位球への立体的投影を考えると，積分路 C は極のない外側の領域を囲んでいるように見なせるから，ただちに

$$A_l^{(1)}(kr)=0 \tag{7.13.43}$$

が導ける．

$A_l^{(2)}(kr)$ に関しては

$$A_l^{(2)}(kr)=\frac{Ae^{-ikr}}{2\,kr}\int_C E_l^*[kr(1-t)]e^{2ikrt}\,d(t,\gamma)dt \tag{7.13.44}$$

と表わせる．(7.13.19)式と(7.13.20)式との間で行なった手法と同じ手法を用いよう．$\bar{u}=2\,ikr$，$\bar{s}=\bar{u}t$ としておく．すると $t=\bar{s}/\bar{u}$ で $1-t=(\bar{u}-\bar{s})/\bar{u}$ であるから

$$A_l^{(2)}(kr)=\frac{iAe^{-\bar{u}/2}}{\bar{u}}\int_{\bar{C}} e^{\bar{s}}(\bar{s}/\bar{u})^{i\gamma-1}\left(\frac{\bar{u}-\bar{s}}{\bar{u}}\right)^{-i\gamma-1}E_l^*\left(\frac{\bar{u}-\bar{s}}{2\,i}\right)\frac{d\bar{s}}{\bar{u}} \tag{7.13.45}$$

と表わせる．ここで積分路 $\overline{C}$ は図7.15aのように取るが，ただし今 $\bar{s}$-平面内の分岐点の両端は $\bar{s}=0$ と $\bar{s}=2ikr$ である．したがって $\bar{u}^*=-\bar{u}$ であることを思い出すと

$$
\begin{aligned}
A_l^{(2)}(kr) &= iAe^{-\bar{u}/2}\int_{\overline{C}} e^{\bar{s}}\ \bar{s}^{i\gamma-1}(\bar{u}-\bar{s})^{-i\gamma-1}\, E_l^*\left(\frac{\bar{u}-\bar{s}}{2i}\right) d\bar{s} \\
&= iAe^{-\bar{u}/2}\int_{C_1}\Bigg[e^{s}\, s^{i\gamma-1}\,(\bar{u}-s)^{-i\gamma-1}\, E_l^*\left(\frac{\bar{u}-s}{2i}\right) \\
&\qquad + e^{s+\bar{u}}\,(s+\bar{u})^{i\gamma-1}\,(-s)^{-i\gamma-1}\, E_l^*\left(\frac{-s}{2i}\right)\Bigg] ds \\
&\simeq \frac{iA}{\bar{u}}\Bigg[e^{-\bar{u}/2}\ \bar{u}^{-i\gamma}\int_{C_1} e^{s}\, s^{i\gamma-1}\, E_l^*\left(\frac{\bar{u}}{2i}\right) ds \\
&\qquad + e^{\bar{u}/2}\ \bar{u}^{i\gamma}\int_{C_1} e^{s}(-s)^{-i\gamma-1}\, E_l^*\left(\frac{-s}{2i}\right) ds\Bigg] \\
&\simeq \frac{A}{2kr}\Bigg[e^{-\bar{u}/2}\ \bar{u}^{-i\gamma}\int_{C_1} e^{s}\, s^{i\gamma-1}\frac{1}{(-i)^{l+1}}\, ds \\
&\qquad - (e^{-\bar{u}/2}\ \bar{u}^{-i\gamma})^*\int_{C_1} e^{s}\, s^{-i\gamma-1}\, E_l^*\left(\frac{-s}{2i}\right) ds\Bigg]
\end{aligned}
\tag{7.13.46}
$$

と変形できる．この最後の式で(7.13.39)で与えられた $\bar{u}$ についての $E_l^*(\bar{u}/2i)$ の漸近形を用いた．次に $e^{-\bar{u}/2}\bar{u}^{-i\gamma}=e^{\pi\gamma/2}\,e^{-i(kr+\gamma\ln 2kr)}$ に着目すると，(7.13.46)は

$$
\begin{aligned}
A_l^{(2)}(kr) \simeq -\frac{Ae^{\pi\gamma/2}}{2ikr}\{ & e^{-i[kr-(l\pi/2)+\gamma\ln 2kr]}\,2\pi i g_1(\gamma) \\
& - e^{i[kr-(l\pi/2)+\gamma\ln 2kr]}\,2\pi i g_3(\gamma)\}
\end{aligned}
\tag{7.13.47}
$$

となる．ここで

$2\pi i$

$$2\pi i g_3(\gamma) = i^{l-1}\int_{C_1} e^s\ s^{-i\gamma-1} E_l^*\left(\frac{-s}{2i}\right) ds \tag{7.13.48}$$

と置いた．以上により結局

$$A_l^{(2)}(kr) \simeq -\frac{Ae^{\pi\gamma/2}}{2ikr}[2\pi i g_1(\gamma)]$$

$$\times\left\{e^{-i[kr-(l\pi/2)+\gamma\ln 2kr]} - e^{2i\eta_l(k)} e^{i[kr-(l\pi/2)+\gamma\ln 2kr]}\right\} \tag{7.13.49}$$

と表わせる．ここで位相 $\eta_l(k)$ を楽観的に実数と考え

$$e^{2i\eta_l(k)} = \frac{g_3(\gamma)}{g_1(\gamma)} = \Gamma(1-i\gamma)\, g_3(\gamma) \tag{7.13.50}$$

により導入した．γ は k に依存するので［(7.13.3)を見よ］，$\eta_l(k)$ と書いたことに注意しよう．

$\eta_l(k)$ が実際に実数値の位相であることを，いくつかの簡単な例で手短かに調べよう．$l=0$ に対しては

$$E_0^* = i, \qquad 2\pi i\, g_3(\gamma) = \int_{C_1} e^s\, s^{-i\gamma-1}\, ds = 2\pi i g_1^*(\gamma)$$

$$= \frac{2\pi i}{\Gamma(1+i\gamma)},$$

$$e^{2i\eta_0} = \frac{\Gamma(1-i\gamma)}{\Gamma(1+i\gamma)} \tag{7.13.51}$$

である．$l=1$ に対しては

$$E_1^*(\rho) = -\Big(1 - i/\rho\Big),$$

$$E_1^*\left(\frac{-s}{2i}\right) = -\left(1 - \frac{i}{-s/2i}\right) = -\left(1 - \frac{2}{s}\right),$$

$$2\pi i\, g_3(\gamma) = -\int_{C_1} e^s s^{-i\gamma-1}\left(1 - \frac{2}{s}\right) ds$$

$$= -2\pi i\left[\frac{1}{\Gamma(1+i\gamma)} - \frac{2}{\Gamma(2+i\gamma)}\right]$$

$$= \frac{-2\pi i}{\Gamma(2+i\gamma)}\left[(1+i\gamma) - 2\right] = \frac{2\pi i(1-i\gamma)}{\Gamma(2+i\gamma)},$$

$$e^{2i\eta_1} = \frac{g_3(\gamma)}{g_1(\gamma)} = \frac{(1-i\gamma)\Gamma(1-i\gamma)}{\Gamma(2+i\gamma)} = \frac{\Gamma(2-i\gamma)}{\Gamma(2+i\gamma)} \qquad (7.13.52)$$

である．$l=2$，3，……に対しても同様な構造がくりかえされる．そこで一般の l に対して

$$e^{2i\eta_l} = \frac{\Gamma(1+l-i\gamma)}{\Gamma(1+l+i\gamma)} \qquad (7.13.53)$$

であると推測できる．

最後のまとめとして，クーロンの部分波散乱は一般の部分波散乱（7.6節参照）を単に

$$-\frac{(-i)^l}{2} h_l^{(1)}(kr) \simeq -\frac{e^{i(kr-(l\pi/2))}}{2ikr} \to -\frac{e^{i(kr-(l\pi/2)+\gamma \ln 2kr)}}{2ikr},$$

$$e^{2i\delta_l} \to e^{2i\eta_l} = \frac{\Gamma(1+l-i\gamma)}{\Gamma(1+l+i\gamma)} \qquad (7.13.54)$$

と変更するだけで得られることに注意しよう．

問　　題

1.　リップマン-シュウィンガーの公式は，到達距離が有限のポテンシャル，（$0<|x|<a$ に対してのみ）$V(x)\neq 0$，を持つ1次元の透過-反射問題にも適用することができる．

a．入射波 $\langle x|\phi\rangle = e^{ikx}/\sqrt{2\pi}$ が左からやってくるとする．$x>a$ に対しては透過波のみが，$x<-a$ に対しては反射波とはじめからの波があるとすると，特異的な $1/(E-H_0)$ 演算子をどのように扱わなければならないか．$E\rightarrow E+i\varepsilon$ とする処方箋は依然正しいか．適切なグリーン関数の表式を求め，$\langle x|\psi^{(+)}\rangle$ に対する積分方程式を書け．

b．引力的 δ-関数ポテンシャル

$$V = -\left(\frac{\gamma\hbar^2}{2m}\right)\delta(x) \quad , \qquad (\gamma>0)$$

を持つ特別な場合を考える．積分方程式を解き透過振幅と反射振幅を求めよ．得られた結果を Gottfried, 1966, p.52と照合せよ．

c．$\gamma>0$ の1次元 δ-関数ポテンシャルは，γ の任意の値に対して1個の（そしてただ1個の）束縛状態を可能にする．計算した透過・反射振幅は，k を複素変数と見なしたとき予想されるところに束縛状態の極を持つことを示せ．

2．次式を以下のそれぞれの方法で証明せよ．

$$\sigma_{全体} \simeq \frac{m^2}{\pi\hbar^4}\int d^3x\int d^3x'\ V(r)\,V(r')\,\frac{\sin^2 k|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}{k^2|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|^2}$$

a．第1ボルン近似を用いて計算した微分断面積を積分する．

b．2次のボルン近似の前方散乱振幅に，光学定理を適用する［1次のボ

ルン近似を用いると$f(0)$が実数であることに注意せよ].

3. あるポテンシャル

$V=0$,　$r>R$ に対して,　　$V=V_0=$一定,　$r<R$ に対して,

を考える. V_0 は正でも負でもよい. 部分波の方法を用い $|V_0|\ll E=\hbar^2k^2/2m$ かつ $kR\ll 1$ に対して, 微分断面積が等方的であり全断面積が

$$\sigma_{全体}=\left(\frac{16\pi}{9}\right)\frac{m^2V_0^2R^6}{\hbar^4}$$

で与えられることを示せ. 次にエネルギーが少し増加したと仮定せよ. このとき角度分布は

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}=A+B\cos\theta$$

と表わせることを示せ. B/A の近似的表式を求めよ.

4. スピンを持たない粒子が, 弱い湯川ポテンシャル

$$V=\frac{V_0e^{-\mu r}}{\mu r}$$

によって散乱される. $\mu>0$ であるが V_0 は正でも負でもよい. 本文で第1ボルン振幅が

$$f^{(1)}(\theta)=-\frac{2mV_0}{\hbar^2\mu}\frac{1}{[2k^2(1-\cos\theta)+\mu^2]}$$

で与えられることを示した.

a. $f^{(1)}(\theta)$ を用い $|\delta_l|\ll 1$ を仮定して, δ_l に対する表式を第2種のルジャンドル関数

$$Q_l(\zeta)=\frac{1}{2}\int_{-1}^{1}\frac{P_l(\zeta')}{\zeta-\zeta'}d\zeta'$$

を用いて求めよ．

b．展開式

$$Q_l(\zeta)=\frac{l\,!}{1\cdot3\cdot5\cdot\cdots\cdots(2l+1)}\left\{\frac{1}{\zeta^{l+1}}+\frac{(l+1)(l+2)}{2(2l+3)}\frac{1}{\zeta^{l+3}}\right.$$

$$\left.+\frac{(l+1)(l+2)(l+3)(l+4)}{2\cdot4\cdot(2l+3)(2l+5)}\frac{1}{\zeta^{l+5}}+\cdots\cdots\right\},\qquad(|\zeta|>1)$$

を用いて次のことを証明せよ．

(i) ポテンシャルが斥力的（引力的）のとき δ_l は負（正）である．

(ii) ド・ブロイ波長がポテンシャルの到達距離よりずっと長いとき，δ_l は k^{2l+1} に比例する．比例定数を求めよ．

5．x-p_x 間の不確定関係を，剛体球 $V=\infty\,(r>a)$，$V=0\,(r<a)$ の内側に閉じ込められた粒子の基底状態に対して具体的に確かめよ．（ヒント：球対称性を利用せよ．）

6．侵入不可能な球

$$V(r)=\begin{cases}0, & r>a\\ \infty, & r<a\end{cases}$$

による粒子の散乱を考える．

a．s-波 $(l=0)$ の位相のずれを表わす式を導け．（この簡単な問題を解くのに，球ベッセル関数の詳しい性質を知る必要はない．）

b．低エネルギーの極限 $k\to0$ で，全断面積 $\sigma\,[\sigma=\int(d\sigma/d\Omega)d\Omega]$ はいくらか．答を幾何学的断面積 πa^2 と比較せよ．次式を証明せずに用いてよい：

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}=|f(\theta)|^2,$$

$$f(\theta)=\left(\frac{1}{k}\right)\sum_{l=0}^{\infty}(2\,l+1)\,e^{i\delta_l}\sin\delta_l\,P_l(\cos\theta)\;.$$

7．$\delta_l = \Delta(b)|_{b=l/k}$ を用いて高エネルギー散乱に対する位相のずれ δ_l を，(a) ガウス型ポテンシャル $V(r) = V_0 \exp(-r^2/a^2)$ による場合および (b) 湯川ポテンシャル $V(r) = V_0 \exp(-\mu r)/\mu r$ による場合に求めよ．l を増加させる（k を固定して）とき，$l \gg kR$ に対して δ_l が非常に速くゼロに近づくことを確かめよ．ここで R はポテンシャルの“到達距離”である．［$\Delta(b)$ に対する式は(7.4.14)で与えてある．］

8．a．次式

$$\frac{\hbar^2}{2m} < x \left| \frac{1}{E-H_0+i\varepsilon} \right| x' > = -ik \sum_l \sum_m Y_l^m(\hat{r})\, Y_l^{m*}(\hat{r}')$$

$$\times\, j_l(kr_<)h_l^{(1)}(kr_>)$$

を証明せよ．ここで $r_<$ ($r_>$) は，r と r' の中，小さい方（大きい方）を表わす．

b．球対称ポテンシャルの場合，球面波に対するリップマン-シュウィンガー方程式は

$$|Elm(+)> = |Elm> + \frac{1}{E-H_0+i\varepsilon} V|Elm(+)>$$

のように表わされる．(a) を用いると x-表示で表わしたこの方程式から，次のような動径関数 $A_l(k\,;r)$ の方程式が導けることを示せ：

$$A_l(k\,;r) = j_l(kr) - \frac{2mik}{\hbar^2}\int_0^\infty j_l(kr_<)h_l^{(1)}(kr_>)V(r')\,A_l(k\,;r')r'^2dr' \;.$$

また，r を非常に大きくとり

$$f_l(k) = e^{i\delta_l}\frac{\sin\delta_l}{k} = -\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)\int_0^\infty j_l(kr)\,A_l(k\,;r)\;V(r)r^2dr$$

を示せ．

9．斥力的 δ-殻ポテンシャル

$$\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)V(r)=\gamma\,\delta(r-R),\qquad(\gamma>0)$$

による散乱を考える．

a．s-波の位相のずれ δ_0 を $k\,(E=\hbar^2k^2/2m)$ の関数として決める方程式をたてよ．

b．次に γ が

$$\gamma\gg\frac{1}{R},\ k$$

のように非常に大きいとする．$\tan kR$ がゼロに近くないとき，s-波の位相のずれは本文で議論した剛体球の結果と似ていることを示せ．また $\tan kR$ がゼロに近い（が厳密にゼロではない）とき，共鳴的ふるまいが起こりうることを示せ．すなわち k を増加させると $\cot\delta_0$ は正の側からゼロを通過する．$1/\gamma$ のオーダーの項を残し，共鳴の位置を近似的に決めよ．これらの共鳴を，同じ半径の球面の内側に

$$V=0,\quad r<R;\qquad V=\infty,\quad r>R$$

によって閉じ込められた粒子の束縛状態のエネルギーと比較せよ．また

$$\Gamma=\frac{-2}{[d(\cot\delta_0)/dE]|_{E=E_r}}$$

で定義される共鳴幅 Γ の近似的表式を求め，特に γ が大きくなると共鳴が極めて鋭くなることに注目せよ．[注：この問題をもっと高度な方法で解くには Gottfried, 1966, pp.131-141を参照せよ．そこでは $A_l=j_l/D_l$ で定義される D_l-関数の解析性が議論してある．]

10. スピンを持たない粒子が，時間に依存するポテンシャル

$$V(\boldsymbol{r},\ t) = V(\boldsymbol{r})\cos\omega t$$

によって散乱される．遷移振幅をポテンシャルの1次まで計算すると，散乱粒子のエネルギーは $\hbar\omega$ だけ増加ないし減少することを示せ．$d\sigma/d\Omega$ を求めよ．高次の項を考慮するとどのようなことが起こるか，定性的に議論せよ．

11. 水素原子の基底状態による高速電子の弾性散乱に対する微分断面積は

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{4\,m^2e^4}{\hbar^4q^4}\right)\left\{\ 1\ -\ \frac{16}{[\,4\ +(qa_0)^2]^2}\right\}^2$$

で与えられることを示せ（電子の同一性の効果は無視せよ）．

12. 中心力の場の中で運動している1粒子のエネルギーを $E(J_1,\ J_2,\ J_3)$ とする．$(J_1,\ J_2,\ J_3)$ は3個の作用変数である．クーロンポテンシャルに対して，E の関数形はどのように限定されるか．作用変数と角変数で記述する方法を用いて中心力の場における縮退とクーロン場の問題を比較せよ．またベクトル $\boldsymbol{A}$ と関連させよ．［訳注：$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{p}+e^2\mu\,\hat{\boldsymbol{r}}$］

ハミルトニアンが

$$H = \frac{p^2}{2\,\mu} + V(r) + F(\boldsymbol{A}^2)$$

であるとき，いま述べてきたことはどのように変わるか．

量子論で中心力の場における縮退とクーロン場の問題での縮退を対応させて，通常の量子数 $(n,\ l,\ m)$ および量子数 $(k,\ m,\ n)$ を用いて記述せよ．ここで第2の組 $(k,\ m,\ n)$ は波動関数 $\mathscr{D}^k_{mn}(\alpha\beta\gamma)$ を区別するものである．

波動関数 $\mathscr{D}^k_{mn}(\alpha\beta\gamma)$ は球面調和関数にラゲール関数をかけたものと，どのように関係しているか．

付　録　A

（この付録は訳書上巻末におさめられているが，第７章でもよく引用されるので再掲した．）

シュレーディンガーの波動方程式 ——基本的解の要約

ここで解答が可能ないろいろなポテンシャル問題に対して，シュレーディンガーの波動方程式の簡単な解をまとめておく．

A.1.　自由粒子（$V=0$）

平面波，すなわち運動量の固有関数は

$$\psi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{x},\ t)=\frac{1}{(2\pi)^{3/2}}e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}-i\omega t} \qquad (A.1.1)$$

である．ここで

$$\boldsymbol{k}=\frac{\boldsymbol{p}}{\hbar},\quad \omega=\frac{E}{\hbar}=\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m\hbar}=\frac{\hbar\boldsymbol{k}^2}{2m} \qquad (A.1.2)$$

であり，規格化条件は

$$\int\psi_{\boldsymbol{k}'}^{*}\psi_{\boldsymbol{k}}d^3x=\delta^{(3)}(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}') \qquad (A.1.3)$$

である．平面波を重ね合せると，波束による記述ができる．１次元の場合には

$$\psi(x,\ t)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}dkA(k)e^{i(kx-\omega t)},\qquad \left(\omega=\frac{\hbar k^2}{2m}\right) \qquad (A.1.4)$$

となる．$|A(k)|$が $k \simeq k_0$ の近傍で鋭く山を作っている場合，波束は群速度

$$v_g \simeq \left(\frac{d\omega}{dk}\right)_{k_0} = \frac{\hbar k_0}{m} \tag{A.1.5}$$

で移動する．最小波束の時間的発展は

$$\psi(x,\ t) = \left[\frac{(\Delta x)_0^2}{2\pi^3}\right]^{1/4} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-(\Delta x)_0^2(k-k_0)^2 + ikx - i\omega(k)t} dk,$$

$$\omega(k) = \frac{\hbar k^2}{2m} \tag{A.1.6}$$

のように記述することができる．このとき

$$|\psi(x,\ t)|^2 = \left\{\frac{1}{2\pi(\Delta x)_0^2[1+(\hbar^2 t^2/4m^2)(\Delta x)_0^{-4}]}\right\}^{1/2}$$

$$\times \exp\left\{-\frac{(x-\hbar k_0 t/m)^2}{2(\Delta x)_0^2[1+(\hbar^2 t^2/4m^2)(\Delta x)_0^{-4}]}\right\} \tag{A.1.7}$$

であるから，波束の幅は

$$(\Delta x)_0,\ \ t=0 \longrightarrow (\Delta x)_0\left[1+\frac{\hbar^2 t^2}{4m^2}(\Delta x)_0^{-4}\right]^{1/2}, \quad t>0 \tag{A.1.8}$$

のように拡がっていく．

A.2. 区分区分で一定な1次元ポテンシャル

基本解は次の通りである：

$E > V_0 = V_0$： $\psi_E(x) = c_+ e^{ikx} + c_- e^{-ikx}$,

$$k = \sqrt{\frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}} \tag{A.2.1}$$

$E < V = V_0$（古典的に許されない領域）：

$$\psi_E(x) = c_+ e^{\varkappa x} + c_- e^{-\varkappa x}, \quad \varkappa = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}} \tag{A.2.2}$$

（考える領域中に $x = \pm\infty$ が含まれるときは，$c_\pm$ をゼロとしなければならない．複合同順）

堅い壁のポテンシャル（１次元の箱）

このとき

$$V = \begin{cases} 0\ , & 0 < x < L \\ \infty\ , & \text{それ以外} \end{cases} \tag{A.2.3}$$

である．波動関数とエネルギー固有値は

$$\begin{aligned} \psi_E(x) &= \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi\, x}{L}\right), \qquad n = 1, 2, 3 \cdots \\ E &= \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{2mL^2} \end{aligned} \tag{A.2.4}$$

である．

井戸型ポテンシャル

ポテンシャル V は

$$V = \begin{cases} 0\ , & |x| > a \\ -V_0\ , & |x| < a \qquad (V_0 > 0) \end{cases} \tag{A.2.5}$$

である．束縛状態（$E < 0$）の解は

$$\psi_E \sim \begin{cases} e^{-\varkappa |x|}\ , & |x| > a \\ \cos kx,\ (\text{偶パリティー}) & |x| < a \\ \sin kx,\ (\text{奇パリティー}) & |x| < a \end{cases} \tag{A.2.6}$$

である．ここで

$$k = \sqrt{\frac{2m(-|E| + V_0)}{\hbar^2}}\ , \quad \varkappa = \sqrt{\frac{2m|E|}{\hbar^2}} \tag{A.2.7}$$

である．エネルギー $E=-\hbar^2\kappa^2/2m$ の取り得る不連続値は

$$\begin{aligned} ka\tan ka &= \kappa a \quad (\text{偶パリティー}) \\ ka\cot ka &= -\kappa a \quad (\text{奇パリティー}) \end{aligned} \tag{A.2.8}$$

を解いて決められる．κ と k が

$$\frac{2mV_0a^2}{\hbar^2}=(k^2+\kappa^2)a^2 \tag{A.2.9}$$

によって関連していることにも注意しよう．

A.3.　透過-反射の問題

ここで透過率 T は，入射波の流束に対する透過波の流束の比と定義する．以下，簡単な例を考察する．

井戸（$V=0$, $|x|>a$; $V=-V_0$, $|x|<a$）

$$\begin{aligned} T &= \frac{1}{\{1+[(k'^2-k^2)^2/4k^2k'^2]\sin^2 2k'a\}} \\ &= \frac{1}{\{1+[V_0^2/4E(E+V_0)]\sin^2(2a\sqrt{2m(E+V_0)/\hbar^2})\}} \end{aligned} \tag{A.3.1}$$

ここで

$$k=\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}},\quad k'=\sqrt{\frac{2m(E+V_0)}{\hbar^2}} \tag{A.3.2}$$

である．共鳴現象が

$$2a\sqrt{\frac{2m(E+V_0)}{\hbar^2}}=n\pi,\qquad n=1,2,3\cdots \tag{A.3.3}$$

のとき起こることに注意しよう.

ポテンシャル障壁($V=0$, $|x|>a$; $V=V_0>0$, $|x|<a$)

第1の場合：$E < V_0$

$$T = \frac{1}{\{1+[(k^2+\varkappa^2)^2/4k^2\varkappa^2]\sinh^2 2\varkappa a\}}$$
$$= \frac{1}{\{1+[V_0^2/4E(V_0-E)]\sinh^2(2a\sqrt{2m(V_0-E)/\hbar^2})\}}$$
(A.3.4)

第2の場合：$E > V_0$. この場合は井戸の場合と同じ式で V_0 を $-V_0$ で置き換えたものになる.

ポテンシャルの段($V=0, x<0$; $V=V_0, x>0$ および $E>V_0$)

$$T = \frac{4kk'}{(k+k')^2} = \frac{4\sqrt{(E-V_0)E}}{(\sqrt{E}+\sqrt{E-V_0})^2} \tag{A.3.5}$$

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}, \quad k' = \sqrt{\frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}} \tag{A.3.6}$$

一般的なポテンシャル障壁($V(x)>E$, $a<x<b$; $V(x)<E$, $[a, b]$ 以外の領域)

T に対する JWKB 近似解は

$$T \simeq \exp\left\{-2\int_a^b dx\sqrt{\frac{2m[V(x)-E]}{\hbar^2}}\right\} \tag{A.3.7}$$

であり，a，b は古典的転回点である．*

A. 4.　調和振動子

ポテンシャルは

$$V(x) = \frac{m\omega^2 x^2}{2} \tag{A.4.1}$$

である．ここで無次元の変数

$$\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\, x \tag{A.4.2}$$

を導入すると，エネルギー固有関数は

$$\psi_E = (2^n n!)^{-1/2}\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-\xi^2/2} H_n(\xi) \tag{A.4.3}$$

と書ける．エネルギー準位は

$$E = \hbar\,\omega\left(n + \frac{1}{2}\right),\quad n = 0, 1, 2 \cdots \tag{A.4.4}$$

である．エルミート多項式 $H_n(\xi)$ は次のような性質を持つ：

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{\partial^n}{\partial \xi^n} e^{-\xi^2},$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} H_{n'}(\xi) H_n(\xi) e^{-\xi^2} d\xi = \pi^{1/2} 2^n n! \delta_{nn'},$$

$$\frac{d^2}{d\xi^2} H_n - 2\xi \frac{dH_n}{d\xi} + 2nH_n = 0, \tag{A.4.5}$$

$$H_0(\xi) = 1, \qquad H_1(\xi) = 2\xi,$$

$$H_2(\xi) = 4\xi^2 - 2,\quad H_3(\xi) = 8\xi^3 - 12\xi,$$

---

* JWKB は Jeffreys-Wentzel-Kramers-Brillouin を表わす．

$$H_4(\xi) = 16\xi^4 - 48\xi^2 + 12.$$

A.5. 中心力の問題 [球対称ポテンシャル $V=V(r)$]

ここで基本になる微分方程式は

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\psi_E}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\psi_E}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2\psi_E}{\partial\phi^2}\right] + V(r)\psi_E = E\psi_E \tag{A.5.1}$$

である．この式の球対称ポテンシャル $V(r)$ は

$$\lim_{r\to 0} r^2 V(r) \to 0 \tag{A.5.2}$$

を満たすとする．変数分離法を用い

$$\psi_E(\boldsymbol{x}) = R(r)Y_l^m(\theta, \phi) \tag{A.5.3}$$

とすると，角度部分の方程式として

$$-\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right]Y_l^m = l(l+1)Y_l^m \tag{A.5.4}$$

が導かれる．ここで球面調和関数

$$Y_l^m(\theta, \phi), \quad l = 0, 1, 2, \cdots \tag{A.5.5}$$
$$m = -l, -l+1, \cdots, +l$$

は

$$-i\frac{\partial}{\partial\phi}Y_l^m = mY_l^m \tag{A.5.6}$$

を満たす．$Y_l^m(\theta, \phi)$ には次のような性質がある：

$$Y_l^m(\theta, \phi) = (-1)^m\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}\frac{(l-m)!}{(l+m)!}}\,P_l^m(\cos\theta)e^{im\phi} \qquad (m \geq 0),$$

$$Y_l^m(\theta, \phi) = (-1)^{|m|} Y_l^{|m|*}(\theta, \phi), \qquad (m < 0),$$

$$P_l^m(\cos\theta) = (1 - \cos^2\theta)^{m/2} \frac{d^m}{d(\cos\theta)^m} P_l(\cos\theta), \qquad (m \geq 0),$$

$$P_l(\cos\theta) = \frac{(-1)^l}{2^l l!} \frac{d^l (1-\cos^2\theta)^l}{d(\cos\theta)^l},$$

$$Y_0^0 = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}, \qquad Y_1^0 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta, \tag{A.5.7}$$

$$Y_1^{\pm 1} = \mp\sqrt{\frac{3}{8\pi}}(\sin\theta)e^{\pm i\phi},$$

$$Y_2^0 = \sqrt{\frac{5}{16\pi}}(3\cos^2\theta - 1),$$

$$Y_2^{\pm 1} = \mp\sqrt{\frac{15}{8\pi}}(\sin\theta\cos\theta)e^{\pm i\phi},$$

$$Y_2^{\pm 2} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}}(\sin^2\theta)e^{\pm 2i\phi},$$

$$\int Y_{l'}^{m'*}(\theta, \phi)\, Y_l^m(\theta, \phi) d\Omega = \delta_{ll'}\delta_{mm'}, \quad \left[\int d\Omega = \int_0^{2\pi} d\phi \int_{-1}^{+1} d(\cos\theta)\right]$$

(A.5.3)の動径部分を求めるために

$$u_E(r) = rR(r) \tag{A.5.8}$$

を定義しよう．すると動径部分の方程式は，同等な 1 次元問題の方程式

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2 u_E}{dr^2} + \left[V(r) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2}\right]u_E = Eu_E \tag{A.5.9}$$

に書きかえられる．これを境界条件

$$u_E(r)|_{r=0} = 0$$

の下で解く．自由粒子 $[V(r) = 0]$ の場合，球座標で

$$R(r) = c_1 j_l(\rho) + c_2 n_l(\rho) \tag{A.5.10}$$

（原点が含まれるときは $c_2=0$）

が得られる．ここで ρ は無次元の変数

$$\rho \equiv kr, \qquad k=\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \tag{A.5.11}$$

である．

ここでベッセル関数および球ベッセル，球ハンケル関数の，よく使われている性質を列記しておく必要がある．球ベッセル関数は

$$\begin{aligned}
j_l(\rho) &= \left(\frac{\pi}{2\rho}\right)^{1/2} J_{l+1/2}(\rho),\\
n_l(\rho) &= (-1)^{l+1}\left(\frac{\pi}{2\rho}\right)^{1/2} J_{-l-1/2}(\rho),\\
j_0(\rho) &= \frac{\sin\rho}{\rho}, \qquad n_0(\rho) = -\frac{\cos\rho}{\rho}\\
j_1(\rho) &= \frac{\sin\rho}{\rho^2}-\frac{\cos\rho}{\rho}, \quad n_1(\rho) = -\frac{\cos\rho}{\rho^2}-\frac{\sin\rho}{\rho},\\
j_2(\rho) &= \left(\frac{3}{\rho^3}-\frac{1}{\rho}\right)\sin\rho-\frac{3}{\rho^2}\cos\rho,\\
n_2(\rho) &= -\left(\frac{3}{\rho^3}-\frac{1}{\rho}\right)\cos\rho-\frac{3}{\rho^2}\sin\rho
\end{aligned} \tag{A.5.12}$$

である．極限 $\rho\to 0$ で主な寄与を与える項は

$$j_l(\rho) \underset{\rho\to 0}{\longrightarrow} \frac{\rho^l}{(2l+1)!!}, \qquad n_l(\rho) \underset{\rho\to 0}{\longrightarrow} -\frac{(2l-1)!!}{\rho^{l+1}} \tag{A.5.13}$$

となり，ここで

$$(2l+1)!! \equiv (2l+1)(2l-1)\cdots\cdots 5\cdot 3\cdot 1 \tag{A.5.14}$$

である．大きな ρ に対する漸近形は

$$j_l(\rho) \underset{\rho\to\infty}{\longrightarrow} \frac{1}{\rho}\cos\left[\rho-\frac{(l+1)\pi}{2}\right],$$

$$n_l(\rho) \underset{\rho\to\infty}{\longrightarrow} \frac{1}{\rho}\sin\left[\rho - \frac{(l+1)\pi}{2}\right] \tag{A.5.15}$$

である.

制約 (A.5.8) および (A.5.9) により, $R(r)$は $r=0$ で有限でなければならないので, (A.5.10)と(A.5.13)から分かるように, $\rho\to 0$ のとき特異性を持つ $n_l(\rho)$ の項は除かれなければならない. したがって $R(r)=c_1 j_l(\rho)$ [または第 7 章7.6 節の記号で, $A_l(r) = R(r) = c_1 j_l(\rho)$] が得られる. 3 次元の井戸型ポテンシャルに対しては, $r < R$ で $V = -V_0$ ($V_0 > 0$) だから, 求める解は

$$R(r) = A_l(r) = (\text{定数})\cdot j_l(\alpha r) \tag{A.5.16}$$

ただし

$$\alpha = \left[\frac{2m(V_0 - |E|)}{\hbar^2}\right]^{1/2}, \qquad r < R \tag{A.5.17}$$

である. 式(7.6.30)で議論されるように, $V=0$ である外部 ($r > R$) での解は, 球ハンケル関数の 1 次結合で書くことができる. この関数は次のように定義される:

$$\begin{aligned} h_l^{(1)}(\rho) &= j_l(\rho) + i n_l(\rho), \\ h_l^{(1)*}(\rho) &= h_l^{(2)}(\rho) = j_l(\rho) - i n_l(\rho) \end{aligned} \tag{A.5.18}$$

これらは(A.5.15)により $\rho\to\infty$ で次のような漸近形を持つ:

$$\begin{aligned} h_l^{(1)}(\rho) &\underset{\rho\to\infty}{\longrightarrow} \frac{1}{\rho} e^{i[\rho-(l+1)\pi/2]}, \\ h_l^{(1)*}(\rho) = h_l^{(2)}(\rho) &\underset{\rho\to\infty}{\longrightarrow} \frac{1}{\rho} e^{-i[\rho-(l+1)\pi/2]}. \end{aligned} \tag{A.5.19}$$

3 次元井戸型ポテンシャルの束縛状態のエネルギー準位に興味がある

ならば，$V(r)=0$，$r>R$ であるから

$$u_l(r)=rA_l(r)=(\text{定数})\cdot e^{-\varkappa r}f\left(\frac{1}{\varkappa r}\right)$$

$$\varkappa=\left(\frac{2m|E|}{\hbar^2}\right)^{1/2} \tag{A.5.20}$$

を考える．(A.5.19)で主要項が与えられている漸近展開に，逆符号の指数の項が含まれていない限り，$r>R$ に対して求める解として(A.5.20)から

$$\begin{aligned}A_l(r)&=(\text{定数})\cdot h_l^{(1)}(i\varkappa r)\\&=(\text{定数})\cdot\Big[j_l(i\varkappa r)+in_l(i\varkappa r)\Big]\end{aligned} \tag{A.5.21}$$

が得られる．この関数のはじめの三つは

$$h_0^{(1)}(i\varkappa r)=-\frac{1}{\varkappa r}e^{-\varkappa r}$$

$$h_1^{(1)}(i\varkappa r)=i\left(\frac{1}{\varkappa r}+\frac{1}{\varkappa^2r^2}\right)e^{-\varkappa r}$$

$$h_2^{(1)}(i\varkappa r)=\left(\frac{1}{\varkappa r}+\frac{3}{\varkappa^2r^2}+\frac{3}{\varkappa^3r^3}\right)e^{-\varkappa r} \tag{A.5.22}$$

である．

最後に，自由粒子［$V(r)=0$］でなく一定値のポテンシャル $V(r)=V_0$ の場合を考えるときは，自由粒子の解［(A.5.10)と(A.5.11)］で単に E を $E-V_0$ に置きかえればよい．$E<V_0$ の場合も，$\varkappa=\sqrt{2m(V_0-E)/\hbar^2}$ として $h_l^{(1,2)}(i\varkappa r)$ が使えることに注意しよう．

A.6.　水素原子

この問題でポテンシャルは

$$V(r)=-\frac{Ze^2}{r} \tag{A.6.1}$$

である．無次元の変数

$$\rho = \left(\frac{8m_e|E|}{\hbar^2}\right)^{1/2} r \tag{A.6.2}$$

を導入すると，エネルギー固有関数と固有値(エネルギー準位)は

$$\psi_{nlm} = R_{nl}(r) Y_l^m(\theta, \phi),$$

$$R_{nl}(r) = -\left\{\left(\frac{2Z}{na_0}\right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3}\right\}^{1/2} e^{-\rho/2} \rho^l L_{n+l}^{2l+1}(\rho),$$

$$E_n = \frac{-Z^2 e^2}{2n^2 a_0} \quad (l \text{ と } m \text{ に依らない}),$$

$$a_0 = \text{ボーア半径} = \frac{\hbar^2}{m_e e^2},$$

$$n \geq l+1, \qquad \rho = \frac{2Zr}{na_0} \tag{A.6.3}$$

で表わされる．上式の中のラゲールの陪多項式は

$$L_p^q(\rho) = \frac{d^q}{d\rho^q} L_p(\rho), \tag{A.6.4}$$

$$L_p(\rho) = e^{\rho} \frac{d^p}{d\rho^p}(\rho^p e^{-\rho}) \tag{A.6.5}$$

で定義されており，その規格化積分(normalization integral)は

$$\int_0^\infty e^{-\rho} \rho^{2l+2} [L_{n+l}^{2l+1}(\rho)]^2 d\rho = \frac{2n[(n+l)!]^3}{(n-l-1)!} \tag{A.6.6}$$

である．動径関数は n が小さい場合

$$R_{10}(r) = \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} 2e^{-Zr/a_0},$$

$$R_{20}(r) = \left(\frac{Z}{2a_0}\right)^{3/2} \left(2 - \frac{Zr}{a_0}\right) e^{-Zr/2a_0}, \tag{A.6.7}$$

$$R_{21}(r)=\left(\frac{Z}{2a_0}\right)^{3/2}\frac{Zr}{\sqrt{3}\,a_0}e^{-Zr/2a_0}$$

で与えられる．動径 r を含む積分として次の式をあげておく．

$$<r^k>\equiv\int_0^\infty drr^{2+k}[R_{nl}(r)]^2$$

とおくとき

$$<r>=\left(\frac{a_0}{2Z}\right)[3n^2-l(l+1)],$$

$$<r^2>=\left(\frac{{a_0}^2n^2}{2Z^2}\right)[5n^2+1-3l(l+1)] \qquad (A.6.8)$$

$$<\frac{1}{r}>=\frac{Z}{n^2a_0}$$

$$<\frac{1}{r^2}>=\frac{Z^2}{\left[n^3{a_0}^2(l+\frac{1}{2})\right]}$$

などである．

訳者増補

断熱変化と幾何学的位相

1982年11月，著者の急逝によって本書の原稿が遺されたあとも，量子力学に関する新たな発展があった．中でも重要なものは，1983年 M.V. ベリーによってなされた幾何学的位相の明確な定式化であろう．断熱変化に伴うこの位相因子は簡潔で美しい幾何学的形式で表現され，物理学のあらゆる分野に普遍的に登場して，量子論に新しい視点を与えた．ある分野では無意識の中によく使われていたこの位相の物理的意味をここで解説し，日本語版「現代の量子力学」の増補としたい．

断熱定理

一様な定常磁場中にある大きさ S のスピンを考える．スピンに付随する磁気モーメントのために，この量子系のエネルギー準位は $2S+1$ 個に分裂する．その n 番目のエネルギー固有値 E_n を持つ状態ケット $|n\rangle$ は，第2章で学んだように時間の経過と共に

$$|n\rangle \rightarrow e^{-iE_nt/\hbar}|n\rangle \tag{S.1}$$

のように位相因子が変化する．これは定常状態の時間変化である．いま，この磁場の向きを非常にゆっくりと変化させたとしよう．するとゆっくりと変化する磁場につれてスピンも向きを変え，時々刻々の磁場方向の成分を一定に保つ．

すなわち磁場が変化してもはじめの量子数 n は変化しない．——これが量子力学で成立する**断熱定理**の代表例である．

一般に断熱定理は，力学系に外部から加えられたゆっくりとした変化に対し，力学的に不変量が存在することを主張する．熱力学系でのエントロピー，古典力学系での作用積分などは，量子系での量子数と同様にこうした断熱不変量である．一体どれほどゆっくりならば**断熱変化**と認められるのかという検討は他の本に譲り［メシア：量子力学 XVII 章参照］，ここでは単にそれぞれの系に固有な運動の時間（例えば振動周期）に較べて十分にゆっくりした時間変化を断熱変化と考えることにしよう†．我々の課題は，断熱変化に際し量子力学系の状態ケット $|n>$ がどのように変化していくかである．(S.1) の単純な拡張とは別に，断熱過程の経路に依存するもう一つの位相因子が存在する．その一般的表式がベリーによって明らかにされたのである．[M. V. Berry, *Proc. R. Soc. Lond.* **A392** (1984), 45.]

ベリーの位相

時間変化する外部パラメータ $\boldsymbol{R}(t)$ を含む系のハミルトニアンを考え，これを $H(\boldsymbol{R}(t))$ と書く．決められた $\boldsymbol{R}(t)$ に対し，n 番目のエネルギー固有状態のケット $|n(\boldsymbol{R}(t))>$ は，時刻 t で成立する固有方程式

$$H(\boldsymbol{R}(t))|n(\boldsymbol{R}(t))> = E_n(\boldsymbol{R}(t))|n(\boldsymbol{R}(t))> \qquad (\text{S}.2)$$

を満たす．ケット $|n(\boldsymbol{R}(t))>$ は規格化されているとする．ここで $\boldsymbol{R}$ に $\boldsymbol{R}(0)=\boldsymbol{R}_0$ から出発する時間変化をさせよう．はじめ $|n(\boldsymbol{R}_0)>$ であった状態ケットが時間発展をして，時刻 t で $|n(\boldsymbol{R}_0),\ t=0;t>$ になったとする．$t_0=0$ に対しこの状態ケットの従うのは時間に依存するシュレーディンガー方程式

$$H(\boldsymbol{R}(t))|n(\boldsymbol{R}_0),\ \ t_0;t> = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|n(\boldsymbol{R}_0),\ \ t_0;t> \qquad (\text{S}.3)$$

† 古典的周期系における断熱不変量やエーレンフェストの断熱仮説に関しては，朝永振一郎：「量子力学 I」みすず書房，を参照．

である．$\boldsymbol{R}(t)$ の変化が十分にゆっくりであるとき，断熱定理により $|n(\boldsymbol{R}_0), t_0; t>$ はそのときどきの $H(\boldsymbol{R}(t))$ の n 番目のエネルギー固有ケット $|n(\boldsymbol{R}(t))>$ に比例するであろう．そこで

$$|n(\boldsymbol{R}_0),\ \ t_0\,;t> = \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\int_0^t E_n(\boldsymbol{R}(t'))dt'\right\}\exp(i\gamma_n(t))|n(\boldsymbol{R}(t))> \tag{S.4}$$

と置く．右辺の第 1 因子は，定常状態における位相変化を積算した通常の動力学的位相因子である［(2.6.7) 式参照］．一方第 2 の因子 $\exp(i\gamma_n(t))$ の位相は（S.4）式を（S.3）式に代入することにより

$$\frac{d}{dt}\gamma_n(t) = i<n(\boldsymbol{R}(t))|\nabla_R n(\boldsymbol{R}(t))>\frac{d}{dt}\boldsymbol{R}(t) \tag{S.5}$$

から決まることが分かる．これより $\gamma_n(t)$ はパラメータ（$\boldsymbol{R}$-）空間の線積分として表わされる：

$$\gamma_n(t) = i\int_{\boldsymbol{R}_0\,\mathrm{C}}^{\boldsymbol{R}(t)}<n(\boldsymbol{R}(t'))|\nabla_R n(\boldsymbol{R}(t'))>d\boldsymbol{R}(t'). \tag{S.6}$$

積分路 C は外部パラメータが $\boldsymbol{R}_0$ から $\boldsymbol{R}(t)$ まで変化したときの断熱過程の経路である．γ_n が実数であることは規格化条件

$$<n(\boldsymbol{R}(t))|n(\boldsymbol{R}(t))>=1 \tag{S.7}$$

の両辺を $\boldsymbol{R}$ で微分すると分かる．（$<n|\nabla_R n>$ が純虚数となる．）表式（S.6）は固有状態の微分 $|\nabla_R n>$ を含むから，ふつう実際の計算が複雑であろう．しかし以下，パラメータ空間で $\boldsymbol{R}$ が閉曲線を一めぐりして時間 T 後に出発点へ戻る場合，すなわち $\boldsymbol{R}(T)=\boldsymbol{R}_0$ となる場合を考えると，この表式は著しく簡単化される．まずストークスの定理を用い，閉曲線 C に沿った線積分を C で囲まれた曲面 $S(\mathrm{C})$ 内の面積分に直す：

$$\gamma_n(\mathrm{C})=i\oint_{\mathrm{C}}<n(\boldsymbol{R})|\nabla_{\boldsymbol{R}}n(\boldsymbol{R})>d\boldsymbol{R}$$
$$=-\iint_{\mathrm{S(C)}}\boldsymbol{V}_n(\boldsymbol{R})\cdot d\boldsymbol{S}, \tag{S.8}$$
$$\boldsymbol{V}_n(\boldsymbol{R})=\mathrm{Im}\,\nabla_{\boldsymbol{R}}\times<n(\boldsymbol{R})|\nabla_{\boldsymbol{R}}n(\boldsymbol{R})>$$
$$=\mathrm{Im}<\nabla_{\boldsymbol{R}}n(\boldsymbol{R})|\times|\nabla_{\boldsymbol{R}}n(\boldsymbol{R})>$$
$$=\mathrm{Im}\sum_{m\neq n}<\nabla_{\boldsymbol{R}}n(\boldsymbol{R})|m(\boldsymbol{R})>\times<m(\boldsymbol{R})|\nabla_{\boldsymbol{R}}n(\boldsymbol{R})>. \tag{S.9}$$

ここでベクトル公式

$$\nabla\times[f(\boldsymbol{x})\nabla g(\boldsymbol{x})]=(\nabla f(\boldsymbol{x}))\times(\nabla g(\boldsymbol{x})) \tag{S.10}$$

を用いた．$|n(\boldsymbol{R})>$ に任意の位相因子 $\exp[i\chi(\boldsymbol{R})]$ がかかり，(S.8) の線積分の被積分関数が

$$<n(\boldsymbol{R})\nabla_{\boldsymbol{R}}n(\boldsymbol{R})> \rightarrow <n(\boldsymbol{R})\nabla_{\boldsymbol{R}}n(\boldsymbol{R})>+i\nabla_{\boldsymbol{R}}\chi(\boldsymbol{R}) \tag{S.11}$$

のように変化しても $\nabla\times\nabla=0$ により $\boldsymbol{V}_n(\boldsymbol{R})$ は変らない（2.6節のゲージ不変性の項参照）．また (S.9) の最後の行で $m=n$ を除けたのは $<n|\nabla_{\boldsymbol{R}}n>$ が純虚数のためである．一方，非対角要素 $<m|\nabla_{\boldsymbol{R}}n>$ は固有方程式 (S.2) を外部パラメータ $\boldsymbol{R}$ に関して微分して得られる次式

$$(\nabla_{\boldsymbol{R}}H(\boldsymbol{R}))|n(\boldsymbol{R})>+H(\boldsymbol{R})(\nabla_{\boldsymbol{R}}|n(\boldsymbol{R})>)$$
$$=(\nabla_{\boldsymbol{R}}E(\boldsymbol{R}))|n(\boldsymbol{R})>+E_n(\boldsymbol{R})|\nabla_{\boldsymbol{R}}n(\boldsymbol{R})> \tag{S.12}$$

に左から $<m|$ をかけることにより

$$<m(\boldsymbol{R})|\nabla_{\boldsymbol{R}}n(\boldsymbol{R})>=\frac{<m(\boldsymbol{R})|\nabla_{\boldsymbol{R}}H(\boldsymbol{R})|n(\boldsymbol{R})>}{E_n-E_m},\quad m\neq n \tag{S.13}$$

と表わされる．したがって面積分 (S.8) の被積分関数は

$$\boldsymbol{V}_n(\boldsymbol{R})=\mathrm{Im}\sum_{m\neq n}\frac{<n(\boldsymbol{R})|\nabla_{\boldsymbol{R}}H(\boldsymbol{R})|m(\boldsymbol{R})>\times<m(\boldsymbol{R})|\nabla_{\boldsymbol{R}}H(\boldsymbol{R})|n(\boldsymbol{R})>}{(E_m(\boldsymbol{R})-E_n(\boldsymbol{R}))^2} \tag{S.14}$$

で与えられる．積分する曲面 $S(\mathrm{C})$ を貫くベクトル $\boldsymbol{V}_n(\boldsymbol{R})$ が，ハミルトニアン $H(\boldsymbol{R})$ の 2 次の微分形式で表わされていることに注目しよう．後に分かるように状態ケット $|n(\boldsymbol{R})\rangle$ そのものに関する知見は $\boldsymbol{V}_n$ の計算にふつう必要でない．一めぐりしたあとの状態ケットは結局

$$|n(\boldsymbol{R}_0),\ \ t=0\,;\,T\rangle = \exp(i\gamma_n(\mathrm{C}))\exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\int_0^T E_n(\boldsymbol{R}(t'))dt'\right\}|n(\boldsymbol{R}_0)\rangle, \tag{S.15}$$

$$\gamma_n(\mathrm{C}) = -\iint_{S(\mathrm{C})} \boldsymbol{V}_n(\boldsymbol{R})\cdot d\boldsymbol{S} \tag{S.16}$$

のように表わされる．ベリーの位相と呼ばれる $\gamma_n(\mathrm{C})$ は外部パラメータの断熱的変化に由来する位相である．これがパラメータ空間の幾何学的性質で決まることを次に述べよう．

縮退点と立体角——幾何学的位相因子

ある外部パラメータ $\boldsymbol{R}^*$ に対して n 番目のエネルギー固有状態 $|n(\boldsymbol{R})\rangle$ が m 番目の状態 $|m(\boldsymbol{R})\rangle$ と縮退するとしよう．パラメータ空間内の縮退点 $\boldsymbol{R}^*$ が実際の断熱変化の経路 C 上にあるわけではないが，縮退の有無は $\gamma_n(\mathrm{C})$ の値に本質的である．表式（S.14）から明らかなように，$\gamma_n(\mathrm{C})$ の被積分関数 $\boldsymbol{V}_n(\boldsymbol{R})$ が $\boldsymbol{R}^*$ において特異的であるからである．

はじめに述べた磁場中のスピン（大きさ S，付随する磁気モーメント $g\mu\boldsymbol{S}/\hbar$）の問題を例にして説明を続けよう．外部パラメータである磁場 $\boldsymbol{B}(t)$ が大きさ B を一定にしつつゆっくりと変化するとき，そのときどきの磁場方向（これを z'- 軸の正方向に選ぶ）のスピン成分を $S_{z'}=m\hbar$（$m=-S,\ \cdots +S$）としよう．この系のハミルトニアンを

$$H(\boldsymbol{B}) = -g\mu\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{B}(t)/\hbar \tag{S.17}$$

と書くとエネルギー固有値は

$$E_m = -g\mu m B \tag{S.18}$$

であり，また

$$\nabla_B H(\boldsymbol{B}) = -g\mu \boldsymbol{S}/\hbar \tag{S.19}$$

である．縮退点はパラメータ空間の原点 $\boldsymbol{B}=0$ で，$2S+1$ 重の縮退がある．磁場 $\boldsymbol{B}$ の強さを一定にしながら向きを回転させ再び元の向きに戻すと，ベクトル $\boldsymbol{B}$ は，半径 B の球上の閉曲線を一周する．したがってベクトル $\boldsymbol{V}_m(\boldsymbol{B})$ は（S.14）より

$$\boldsymbol{V}_m(\boldsymbol{B}) = \mathrm{Im}\sum_{m'\neq m}\frac{<m(\boldsymbol{B})|\,\boldsymbol{S}/\hbar\,|m'(\boldsymbol{B})>\times<m'(\boldsymbol{B})|\,\boldsymbol{S}/\hbar\,|m(\boldsymbol{B})>}{B^2(m'-m)^2} \tag{S.20}$$

と表わされる．計算を簡単にするためにスピン空間の z-軸を各瞬間の磁場方向（z'-軸方向）に一致させよう．中間状態には $m'=m\pm1$ だけが寄与するから，スピン演算子の行列要素の表式（3.5.41）を用い

$$\begin{aligned}<S,\ m\pm1|S_x/\hbar\,|S,\ m> &= \frac{1}{2}\sqrt{(S\mp m)(S\pm m+1)},\\ <S,\ m\pm1|S_y/\hbar\,|S,\ m> &= \frac{\mp i}{2}\sqrt{(S\mp m)(S\pm m+1)}\end{aligned} \tag{S.21}$$

を（S.20）に代入すると，ベクトル $\boldsymbol{V}_m(\boldsymbol{B})$ の各成分が次のように得られる：

$$(\boldsymbol{V}_m(\boldsymbol{B}))_{x'}=0,\ (\boldsymbol{V}_m(\boldsymbol{B}))_{y'}=0,\ (\boldsymbol{V}_m(\boldsymbol{B}))_{z'}=\frac{m}{B^2}. \tag{S.22}$$

すなわちベクトル $\boldsymbol{V}(\boldsymbol{B})$ は磁場 $\boldsymbol{B}$ に平行であり $\boldsymbol{B}$-空間の球面を垂直に貫く．したがって位相 $\gamma_m(\mathrm{C})$ は

$$\gamma_m(\mathrm{C}) = -m\iint_{\mathrm{S(C)}} \frac{\hat{\boldsymbol{B}}}{B^2}\cdot d\boldsymbol{B} = -m\int_{\mathrm{C}} d\Omega = -m\Omega(\mathrm{C}) \qquad (\mathrm{S}.23)$$

で与えられる．ここで $\Omega(\mathrm{C})$ は縮退点に対して閉曲線 C が張る立体角である．$\gamma_m(\mathrm{C})$ を与えるこの簡単な表式は系のダイナミックスを決める磁場の強さやスピンの大きさといった量によらず，もっぱら無次元の量子数 m と立体角 $\Omega(\mathrm{C})$ のみを含んでいる．一めぐりの断熱変化に伴う位相因子 $\exp(+i\gamma_m(\mathrm{C}))$ は，特異的である縮退点に関連した**幾何学的位相因子**といえる．パラメータ空間における積分の概念図を図 S.1に示す．

なお（S.23）に従えば $m\Omega(\mathrm{C})=\pm\pi$ のとき一めぐりの断熱過程により状態ケットは符号を逆転する．これは $m=$ 半整数のフェルミオンの場合に限らず $m=$ 整数のボソンに対しても実現可能なことに注意しよう．

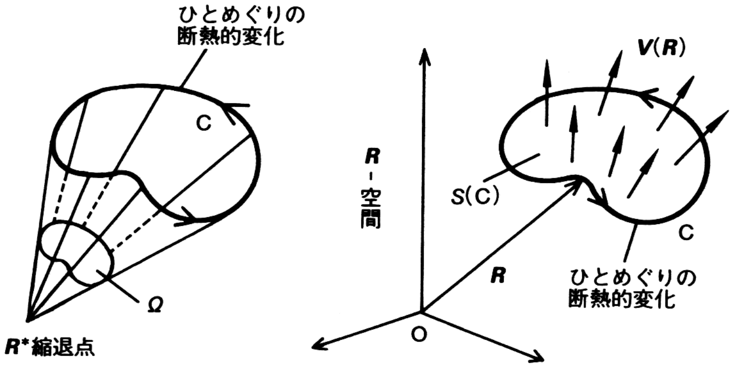


図 S.1. 外部パラメータ $\boldsymbol{R}$-空間．閉曲線 C に沿ったひとめぐりの断熱的変化に対し，**幾何学的位相**は C の囲む曲面 S(C) を貫くベクトル $\boldsymbol{V}$ の面積分で与えられる（右図）．これは縮退点から閉曲線 C を見込む立体角 Ω に比例する．

実験的検証

(S.23) の関係式を検証する実験が，内部にらせん状の静磁場を作るコイルに偏極中性子を通過させて行われた．らせん磁場の一周期を通過して，中性子は時間 T 後にはじめと同じ磁場を受けるようにする．(S.23) 式右辺の立体角 $\Omega(C)$ は，らせん磁場の大きさと，らせん軸方向にかけた別の磁場の大きさの比を変化させることにより，連続的に変化できる．はじめ中性子のスピンが磁場と平行・反平行の二つの固有状態の重ね合せ状態にあったとしよう．断熱変化ではこの重ね合せの割合が保たれる．コイル内を通過する中性子は，経路に沿って方向が変化する磁場と垂直な面内で，スピンを回転させながら進む [(3.2.20) 式参照]．らせん磁場を一周する間に磁場と平行なスピンと反平行なスピンの固有状態の位相には (S.23) に従いたがいに逆向きのベリーの位相 $\mp\Omega/2$ が加わる．3.2節で述べたように，スピンの回転角にはこの 2 倍が寄与する．したがって磁場の一周期を通過する間にこの面内でスピンが回転した全角度 ϕ には動力学的位相の他に幾何学的位相の寄与が加わる：

$$\phi = g\mu BT/\hbar + \Omega. \tag{S.24}$$

中性子の偏極率の測定から ϕ の値が分かるが，測定値 $\Delta\phi \equiv \phi - g\mu BT/\hbar$ は実験条件 (2 方向の磁場の比) によって決まる Ω とほぼ一致して，ベリーの位相を与える (S.23) 式の成立が認められた．[図 S.2を参照] この実験は T. ビッターと D.デュバースによって1987年に行われた．

2 準位交差の一般的考察

外部パラメータ $\boldsymbol{R}=(x, y, z)$ が一般の場合にも，交差する準位があれば縮退点 $\boldsymbol{R}^*$ のまわりで正に上述の磁場中のスピンの例と同じ状況が実現する．パラメータ空間の原点を $\boldsymbol{R}^*$ に選び，エネルギー固有状態 $|+(\boldsymbol{R})\rangle$ と

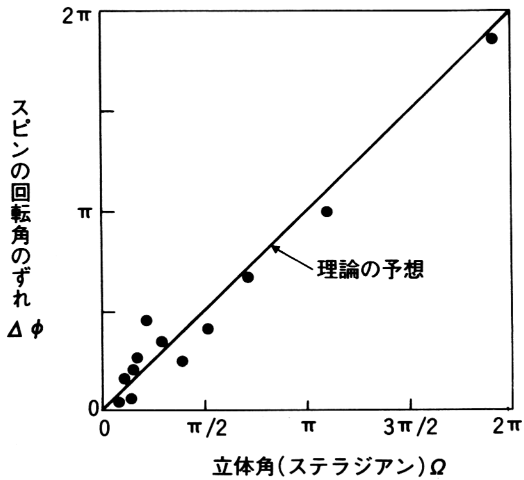


図 S.2. 幾何学的位相の存在を示す実験データ．らせん磁場を通過した中性子スピンの回転角のずれ $\Delta\phi$ は加えた磁場によって決まる立体角 Ω とほぼ一致する．直線は理論の予想．

$|-(\boldsymbol{R})\rangle$ が $\boldsymbol{R}^*=0$ で縮退しているとしよう．それぞれの固有値を $E_+(\boldsymbol{R})\geq E_-(\boldsymbol{R})$ とし，エネルギーは縮退点から測る．ハミルトニアン $H(\boldsymbol{R})$ を原点のまわりで展開し $\boldsymbol{R}$ の 1 次までとり適当な線形変換をする．すると二つの準位を結ぶ一般的なハミルトニアンは 2×2 エルミート行列

$$H(\boldsymbol{R})=\frac{1}{2}\begin{pmatrix} Z & X-iY \\ X+iY & -Z \end{pmatrix}=\frac{1}{2}\boldsymbol{R}\cdot\boldsymbol{\sigma} \qquad \text{(S.25)}$$

の形で表わされる．エネルギー固有値は $E_\pm(\boldsymbol{R})=\pm\frac{1}{2}R$ で 2 準位は縮退点で円錐状に交差する．また $\nabla_{\boldsymbol{R}}H(\boldsymbol{R})=\frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}$ である．これらの表式は磁場中のスピンの例で $m=\pm\frac{1}{2}$ としたものと同値である．したがって

$$\boldsymbol{V}_\pm(\boldsymbol{R})=\pm\frac{\hat{\boldsymbol{R}}}{2R^2} \qquad \text{(S.26)}$$

を面積分して，一般の 2 準位交差の場合の幾何学的因子が

$$\exp(i\gamma_\pm(\mathrm{C}))=\exp\left\{-i\iint \boldsymbol{V}_\pm(\boldsymbol{R})\cdot d\boldsymbol{S}\right\}=\exp\left(\mp\frac{i}{2}\Omega(\mathrm{C})\right) \qquad \text{(S.27)}$$

と得られる．以前と同様に $\Omega(\mathrm{C})$ は縮退点 $\boldsymbol{R}^*$ から見た閉曲線（断熱経路）C の立体角である．

なおベクトル $V_{\pm}(\boldsymbol{R})$ を与える表式（S.26）は，原点に置かれた磁気単極子の作る磁場（2.6.74）と同等であることに注意しよう．パラメータ空間内の縮退点の特異性は磁気単極子のそれと構造上同じであり，単極子の作る磁束が幾何学的位相を決めるといえる．電磁場との類推をさらに述べれば，次の二つの関係式

$$\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r}) = \nabla \times \boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}), \tag{S.28}$$

$$\boldsymbol{V}(\boldsymbol{R}) = \mathrm{Im}\,\nabla_{\boldsymbol{R}} \times < n(\boldsymbol{R}) \,|\, \nabla_{\boldsymbol{R}} n(\boldsymbol{R}) > \tag{S.29}$$

を比較して，$< n(\boldsymbol{R}) \,|\, \nabla_{\boldsymbol{R}} n(\boldsymbol{R}) >$ を縮退点における特異性が作ったある種のベクトルポテンシャルと解釈することができる．（S.11）で見たようにこれはゲージに依存するが，磁束密度 $\boldsymbol{B}$ に対応する $\boldsymbol{V}(\boldsymbol{R})$ はゲージ不変である．

アハラノフ・ボーム効果　再考

経路に沿った積分が位相因子を決める例を，我々は2.6節で扱っている．この中，電場による効果，重力による効果は動力学的位相因子を与えたが，磁場によるアハラノフ・ボーム効果は正に幾何学的位相因子を与える例であったことを示そう．

一本の磁束線 Φ_B を囲む閉曲線 C に沿って箱の中に入れた電子（電荷 $e<0$）を一まわりさせよう（図 S.3参照）．空間に固定した原点と箱の中にとった基準点を結ぶベクトルを $\boldsymbol{R}$ とする．この例では実空間のベクトル $\boldsymbol{R}$ 自身が外部パラメータである．磁場 $\boldsymbol{B}$ をベクトルポテンシャル $\boldsymbol{A}$ を用いて表わすとき，箱の中の電子（位置ベクトル $\boldsymbol{r}$）の n 番目の波動関数は

$$< \boldsymbol{r} \,|\, n(\boldsymbol{R}) > = \exp\left\{ \frac{ie}{\hbar c} \int_{\boldsymbol{R}}^{\boldsymbol{r}} \boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}') \cdot d\boldsymbol{r}' \right\} \psi_n(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{R}) \tag{S.30}$$

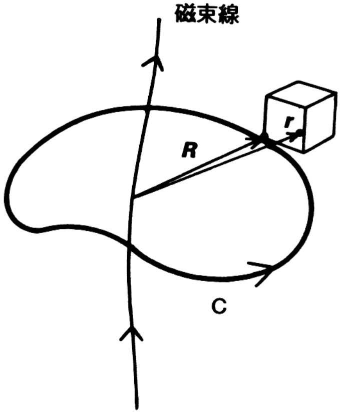


図 S.3. アハラノフ・ボーム効果．箱の中に入れた電子を磁束線のまわりで一周させる．

と書ける．ここで磁場のないとき，箱の中の座標系で位置 $\boldsymbol{r}'$ にある電子の波動関数を $\psi_n(\boldsymbol{r}')$ とした．すると磁場のあるとき，波動関数の外部パラメータに関する微分は容易に計算でき

$$<n(\boldsymbol{R})|\nabla_{\boldsymbol{R}}n(\boldsymbol{R})>=\int d^3x\,\psi_n^*(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{R})\left\{-\frac{ie}{\hbar c}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{R})\psi_n(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{R})+\nabla_{\boldsymbol{R}}\psi_n(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{R})\right\}$$

$$=-\frac{ie\boldsymbol{A}(\boldsymbol{R})}{\hbar c} \tag{S.31}$$

が得られる．積分の第 2 項は箱中の電子に対して消える．これを用いれば幾何学的位相が

$$\gamma_n(\mathrm{C})=\frac{e}{\hbar c}\oint_{\mathrm{C}}\boldsymbol{A}\cdot d\boldsymbol{R}=\frac{e}{\hbar c}\iint_{S(\mathrm{C})}\boldsymbol{B}(\boldsymbol{R})\cdot d\boldsymbol{S}=\frac{e}{\hbar c}\Phi_B \tag{S.32}$$

であることが分かる．この結果は第 2 章で得たアハラノフ・ボーム効果の表式 (2.6.70) そのものである．

複合系と断熱ポテンシャル

いままでの考察では断熱変化をする量 $\boldsymbol{R}$ は外部パラメータであった．しかしさらに興味深いのは，この断熱変化量をも力学変数として系の内部に含め，二つの部分系からなる複合系を量子論的に扱うことである．断熱的変化に対して迅速な応答をする系でのベリーの位相の存在が，ゆっくりとした運動をする力学系にどうはねかえるかを議論したい．その準備としてまず典型的な複合系である（核と電子からなる）多原子分子の問題から述べよう．分子の回転・振動のエネルギー準位を求める際，古くから用いられてきた手法がある．

2原子分子を考え原子核と電子からなる複合系のハミルトニアンを

$$H_T = H_N(\boldsymbol{R}) + H_{el}(\boldsymbol{r}_1, \cdots, \boldsymbol{r}_N) + V(\boldsymbol{R}, \boldsymbol{r}_1, \cdots, \boldsymbol{r}_N) \quad (\text{S}.33)$$

と書く．ここで分子の質量中心を原点に選び，核間の相対位置座標を $\boldsymbol{R}$，電子の位置座標を $\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \cdots, \boldsymbol{r}_N$ とした．ハミルトニアンの第1項，第2項，第3項はそれぞれ核の運動エネルギー，電子系のみのエネルギーおよび核間と核電子間の相互作用エネルギーを表わす．重くて比較的ゆっくりした運動を行う原子核に対して，電子は軽く運動が速いのでここに**断熱近似**を用いる．すなわちまず原子核の位置を固定し，そのときの核の配置に対する電子の固有状態 $|n(\boldsymbol{R})>$ を決める：

$$\{H_{el}(\boldsymbol{r}_1, \cdots, \boldsymbol{r}_N) + V(\boldsymbol{R}, \boldsymbol{r}_1, \cdots, \boldsymbol{r}_N)\}|n(\boldsymbol{R})> = U_n(\boldsymbol{R})|n(\boldsymbol{R})>. \quad (\text{S}.34)$$

$U_n(\boldsymbol{R})$ はこうして得られた n 番目の固有状態のエネルギーである．次に複合系の状態ケットを核のケット $|A>$ と電子のケットの積の形

$$\Psi = |A>|n(\boldsymbol{R})> \quad (\text{S}.35)$$

で近似する．これを複合系のシュレーディンガー方程式 $H_T\Psi = E\Psi$ に代入す

ると

$$(H_N(\boldsymbol{R})+U_n(\boldsymbol{R}))|A>|n(\boldsymbol{R})> = E_n|A>|n(\boldsymbol{R})> \qquad \text{(S.36)}$$

が得られる．$H_N(\boldsymbol{R})$ は核の座標 $\boldsymbol{R}$ に関する微分演算子であるから，核の状態ケット $|A>$ にも電子の状態ケット $|n(\boldsymbol{R})>$ にもかかる．しかし二つの核の相対運動の振幅が核間の平衡距離に比して十分小さい限り，電子の状態ケットを $\boldsymbol{R}$ で微分する項を無視する近似が妥当である．これを**ボルン・オッペンハイマー近似**という．すると（S.36）は核の座標のみを含む簡単な固有方程式

$$(H_N(\boldsymbol{R})+U_n(\boldsymbol{R}))|A> = E_n|A> \qquad \text{(S.37)}$$

に帰結する．上式で核の運動を支配する有効ポテンシャル $U_n(R)$ は**断熱ポテンシャル**と呼ばれ，核間のクーロン反発力と R を固定したときの電子系のエネルギーの和である．$U_n(R)$ は電子の準位ごとに決まる．$U_n(R)$ の最小値は核間の平衡距離を近似的に与え，この平衡距離の近くで分子は振動しまた回転運動を行う．そのエネルギー準位は，ω_n を $U_n(R)$ の最小値での曲率から決まる角振動数とし，I_n を分子の慣性モーメントとすると，近似的に

$$E_n \approx \hbar\omega_n\left(N+\frac{1}{2}\right)+\frac{\hbar^2 L(L+1)}{2I_n}, \qquad \text{(S.38)}$$

$$N=0,\ 1,\ 2,\ \cdots,\quad L=0,\ 1,\ 2,\ \cdots$$

で与えられる．二つの原子核が同種のとき，置換対称性により L にはさらに偶数か奇数かの制限がつく．

動的ヤーン・テラー効果

つぎに本題の幾何学的位相の役割を検討するために，原子核の特定の空間配置 $\boldsymbol{R}^*$ に対して電子状態が縮退する場合を考察しよう．すなわち断熱ポテンシャルが

$$U_n(\boldsymbol{R}^*) = U_m(\boldsymbol{R}^*) \tag{S.39}$$

を満たし $\boldsymbol{R}^*$ で交差する場合である．幾何学的位相を生むのは $\boldsymbol{R}$ 空間内で縮退点 $\boldsymbol{R}^*$ 近傍での一まわりの断熱変化であるから，核間距離 R だけが電子状態を決めるパラメータである2原子分子ではベリーの位相の議論に不十分である．3原子分子（イオン）や結晶内の一群の原子を考える必要がある．ここでは後者を例にとろう．結晶内では対称性のよい原子配置に対して，しばしば結晶場内の電子状態が（例えば一組の d-軌道状態が）エネルギー的に縮退する．このとき一般に結晶がわずかにひずんで低い対称性をとり，電子のエネルギーを下げて安定な状態に落着く．この現象を**ヤーン・テラー効果**と呼ぶ．簡単のために平面内の4個の原子に囲まれた中央のイオンについて，その電子状態を考えよう．いま4原子が正方形に配置するとき，互いに異なる方向に軌道をのばしている電子状態 $|a\rangle$, $|b\rangle$ が縮退しているとする．格子の変形はこの二重縮退をとく．原子の変位を正方格子点を平衡点とする基準振動の座標を用いて表わそう．基準振動のモードのうち縮退した電子状態と結合するものとして，図S.4のような二つの独立なモードA，Bに着目する．その基準座標を Q_a，

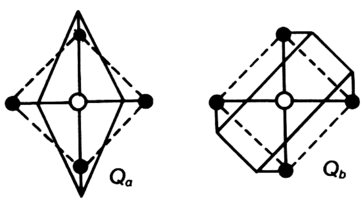


図 S.4. ヤーン・テラー効果を起こす格子のひずみ．基準モード Q_a , Q_b.

Q_b とし，A，Bは等しい基準振動数 ω を持つとしよう†．一方，電子系は縮退した2準位の線形結合

$$|\alpha\rangle = C_a|a\rangle + C_b|b\rangle \tag{S.40}$$

† このヤーン・テラー効果の説明は概念的なもので現実とは異なる．

で表わされる．すると電子系と結合する基準振動の有効ハミルトニアンが，P_a ,P_b を Q_a ,Q_b に共役な運動量として

$$\frac{P_a^2+P_b^2}{2\mu}+\frac{\mu\omega^2}{2}(Q_a^2+Q_b^2)-K\begin{pmatrix}-Q_a & Q_b\\ Q_b & Q_a\end{pmatrix} \tag{S.41}$$

の形に書ける．μ は基準振動の有効質量で，K は電子・格子間の結合の強さである．相互作用を表わす行列は電子の状態ベクトル $\begin{pmatrix}C_a\\ C_b\end{pmatrix}$ にかかる．いま原子変位の振動は小さいとして，相互作用を基準座標 Q_a, Q_b の 1 次で表わした．ここで基準座標を

$$Q_a=\rho\cos\theta,\quad Q_b=\rho\sin\theta \tag{S.42}$$

に固定して電子系の固有エネルギー ε と固有ケットを求めると

$$-K\rho\begin{pmatrix}-\cos\theta & \sin\theta\\ \sin\theta & \cos\theta\end{pmatrix}\begin{pmatrix}C_a\\ C_b\end{pmatrix}=\varepsilon\begin{pmatrix}C_a\\ C_b\end{pmatrix} \tag{S.43}$$

を解いて

$$\varepsilon=\pm K\rho, \tag{S.44}$$

$$\left.\begin{aligned}|+(\theta)\rangle&=\cos\frac{\theta}{2}|a\rangle-\sin\frac{\theta}{2}|b\rangle\\ |-(\theta)\rangle&=\sin\frac{\theta}{2}|a\rangle+\cos\frac{\theta}{2}|b\rangle\end{aligned}\right. \tag{S.45}$$

が得られる．(S.41) と (S.44) により基準座標の断熱ポテンシャルは 2 価関数

$$V_{\rm ad}^{\pm}(\rho)=\frac{1}{2}\mu\omega^2\rho^2\pm K\rho \tag{S.46}$$

で与えられる．Q_a ,Q_b の関数として断熱ポテンシャル面を図示すれば図S.5

のような“メキシコ帽”の形である．ポテンシャルは軸対称の 2 面からなり $\rho_0=K/\mu\omega^2$ で最小値をとる．

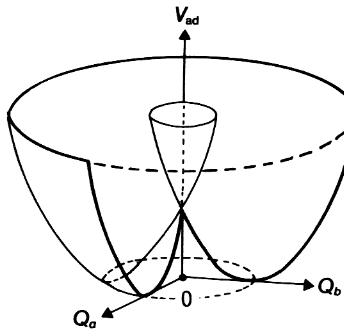


図 S.5. 動的ヤーン・テラー効果を起こす断熱ポテンシャル面（S.46）.

ここで電子の状態ケット（S.45）が軸のまわりの 2π 回転に対して符号を変えること

$$|\pm(\theta=2\pi)\rangle=(-1)|\pm(\theta=0)\rangle \tag{S.47}$$

に注目しよう．これは3.2節で議論した $S=\dfrac{1}{2}$ のスピンの回転と数式上同様であり，回転に対するケットの正弦的依存性（S.45）が回転角の半分（$\theta/2$）であることによる．もちろんいま符号を変えたのは電子系の軌道状態のケットであり，スピンは関与していない．等式（S.47）右辺の因子（-1）が正にベリーの位相因子であることは容易に分かる．すなわち Q_aQ_b- 平面の原点が電子系の縮退点であるが，このまわりを点（Q_a, Q_b）が一周するときの“立体角”は 2π である．したがって一般式（S.27）により $\exp(\mp i\,2\pi/2)=-1$ の幾何学的位相因子が電子の状態ケットにかかる．このようなベリーの位相は，すでに1963年に G.ヘルツベルクと H.C.ロンゲット・ヒギンズが多原子分子に対して縮退した結合系の問題を解いた際，極めて自然に取り入れていた．

さてこのように縮退した二つの格子振動のモードと結合する電子・格子複合系では，断熱ポテンシャルの最小値が“井戸”でなく連続的な“峡谷”

を作るので，格子の動的な変形と電子系の断熱的状態変化が一体である．これを**動的ヤーン・テラー効果**という．そこで断熱ポテンシャル（S.46）の下での基準座標（Q_a, Q_b）すなわち（ρ, θ）の動的な運動を考察し，ベリーの位相の影響を見い出そう．解くべき2次元のシュレーディンガー方程式は

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\partial^2}{\partial\rho^2}+\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}+\frac{1}{\rho^2}\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}\right)+V^{\pm}_{\mathrm{ad}}(\rho)\right\}\Psi(\rho,\theta) = E\Psi(\rho,\theta) \tag{S.48}$$

であり，いま波動関数は核の部分 $\varphi_{\pm}(\rho,\theta)$ と電子のケットの積の和

$$\Psi(\rho,\theta)=\varphi_{+}(\rho,\theta)|+(\theta)> + \varphi_{-}(\rho,\theta)|-(\theta)> \tag{S.49}$$

で表わされる．（S.48）式で $V^{\pm}_{\mathrm{ad}}$ と書いた断熱ポテンシャルは，$\Psi(\rho,\theta)$ の中の φ_{+} には V^{+}_{ad} が，φ_{-} には V^{-}_{ad} がかかることを表わす．この方程式は変数分離型であるから核の波動関数を

$$\varphi_{\pm}(\rho,\theta)=f_{\pm}(\rho)e^{ij\theta} \tag{S.50}$$

と置けば解ける．ここで重要なのは電子と格子の複合系全体を記述する状態関数 $\Psi(\rho,\theta)$ はやはり一価でなければならないことである．電子系のケットは θ が 2π 回転すると符号を逆転する．したがってこれを打消すように $\varphi_{\pm}(\rho,\theta)$ も符号を変えなければならない！　この要請から $\exp(ij2\pi)=-1$，すなわち

$$j=(l+\frac{1}{2})=\text{半整数},\ (l=\text{整数}) \tag{S.51}$$

が結論できる．ベリーの位相の存在は原子の運動を記述する量子数を，通常の整数から半整数に変えたのである†．

方程式（S.48）は二つの断熱準位が十分離れているとき，$\varphi_{+}(\rho,\theta)|+(\theta)>$ と $\varphi_{-}(\rho,\theta)|-(\theta)>$ 間の混合を無視して解くことが許される．

† ベリーの位相が力学変数の量子化条件を変更することに関しては，経路積分と作用関数を用いた一般的議論が倉辻・飯田によりなされている．*Prog. Theor. Phys.* **74**（1985），439.

するとポテンシャルの谷付近の低エネルギー励起は近似的に

$$E_{n,j} \approx \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega + \frac{\hbar^2\left(j^2+\frac{1}{4}\right)}{2\mu\rho_0^2},$$

（n：整数，j：半整数）　　(S.52)

と表わせる．これは基準モードの動径方向の振動エネルギーと平面内の回転エネルギーの和である．（第2式の分子にある $\frac{1}{4}$ は電子系からの寄与である．）格子変形の描像でいえばそれぞれは，原子変位の大きさが振動するエネルギーと変形パターンが移り変るエネルギーである．このような運動の準位は，結晶中のイオンや多原子分子気体を対象にした分光測定や各種の物性測定を通じて実験的によく解析されており，回転準位に現われる半整数の量子化もその分野の人達にはなじみ深いことであった．ベリーの論文以降，改めて3原子分子 Na_3 のガスについての精密な分光実験がG.デラクレタス達によって1986年に行われ，半整数量子化を再確認している．

幾何学的位相の普遍性

以上，量子系を例にしてベリーの位相といわれる幾何学的位相を議論してきたが，既に気付かれたようにこの位相を与える一般式（S.27）にはプランク定数が登場しない．この点は第2章で考察した動力学的因子（2.6.7）とは根本的に異なる．したがって，ベリーによる最初の導出は量子力学に基づいているものの，幾何学的因子自身は量子系・古典系を問わず普遍的なものと推測される．では断熱変化を受ける古典系のどこに幾何学的位相が見い出されるであろうか．

もっとも量子論的（かつ相対論的）でありながら古典電磁気学でも扱うことができる光に関して，ベリーの位相の検出がなされている．らせん状に曲げた光ファイバーの中を直線偏光を通過させ，その偏光面の回転を観測する

のである．量子論で扱うときフォトンはスピン1の粒子で，固有状態のスピンは進行方向かその逆方向に向いている（これをヘリシティの固有値が ±1 という）．それぞれはまわる向きを互いに異にする円偏光であるが，この重ね合せ状態の直線偏光が一ひねりした光ファイバーを通過するとき，進行方向のベクトル（いまこれが断熱変化量である）は閉曲線を描く．（このときスピンも回転する．）その結果，重ね合せ状態のそれぞれにベリーの位相が加わり，したがって偏光面が回転する．チャオとウーと富田によって1986年になされた実験で，偏光面の回転角と光ファイバーの曲げ方で決まる立体角との一致が検証された．一方，この結果は古典電磁気学によっても説明される．光ファイバー内で電場ベクトルが常に平行移動を重ねていった結果，光の入口・出口が平行でも途中がねじれた光ファイバーでは偏光面のずれが残るという解釈である．

一方，古典力学系でも自転する地球上で円錐振り子を振らせるとき，幾何学的位相が現われる．静止した座標系から見て，ある地点の重力の方向が自転により変化する時間は振り子の周期に較べれば圧倒的に長い．すなわち地球の自転に伴って，振り子に働く重力の方向は断熱的に変化する．いま円錐振り子の軌道面内の回転角速度を ω としよう．丸一日（自転周期の時間 T）たったときの円錐振り子の全回転角 θ には，単純に予測される動力学的角度 ωT から $\Delta\theta$ だけのずれが生じている．すなわち

$$\theta = \omega T + \Delta\theta \tag{S.53}$$

である．この $\Delta\theta$ は測定地の緯度に依存するが振り子の運動を決めている重力やひもの長さによらない．つまりこれは幾何学的位相でありこのような角度を一般に**ハネイの角**と呼ぶ．

ところでこの現象は変化する磁場中での量子スピンの回転と全く類似している．それぞれの場合の全回転角に対する表式（S.24）と（S.53）を比較してみよう．$\Delta\theta = \Omega$ が推測できる．円錐振り子の場合，実際にそうである．すなわちハネイの角は振り子に働く重力のベクトルが地球の自転の結果一めぐりして描く閉回路を地球の中心から見込む立体角に等しい．これは量子力学の

ベリーの位相に対応する古典力学での幾何学的位相である．

このように，断熱変化に伴う幾何学的位相は古典論・量子論を問わず，振動子系，光学系，スピン系，分子系…といった様ざまな系に登場している．固体物理では先に述べた動的ヤーン・テラー効果の他，分数量子ホール効果の説明にも用いられている．また場の理論に対しても少からぬ影響を与えているようである．幾何学的位相を知らなくても，シュレーディンガー方程式やニュートン方程式あるいはマックスウェル方程式や経路積分をきちんと扱えば自然にこの位相はとり入れられるであろう．しかし幾何学的位相の存在があらわになったことで，量子論に対する我々の理解は深められたといえるであろう．

---

† 415頁（5.2.13）式に対する訳注：固有ケットの 1 次摂動に関するこの節の議論は不十分で，実際（5.2.13）には，空間 D 内のケットからの寄与も加わる．原著改訂版 p.298-301を参照．

† 599頁 7.13に対する訳注：この節は原著改訂版で再構成されているが，主要な結論に変わりはない．

訳者あとがき

本書はJ. J. Sakurai, Modern Quantum Mechanics, Benjamin, 1985の全訳である．訳に当たってはできるだけ原文に沿った表現で，著者の特徴である分かり易い記述が伝わるように努めた．訳文のすべてを著者のよき友人でおられた筑波大学の原康夫教授（素粒子論専攻）に見て頂き，訳に関しまた内容に関し貴重なご意見を頂いた．訳書がこうして完成したのは原さんの親身のご支援の賜物である．巻頭の序文を寄せて下さったこととあわせて心からの感謝を述べたい．

原本は1982年11月急逝した著者桜井純の遺稿から成る．著者はシカゴ大学とカリフォルニア大学ロサンジェルス校（UCLA）において，多年にわたり量子力学の講義を行ってきた．その出版に至る経過は本書の序文に書かれているが，遺稿の収集から編集、補充や校正まで実に多くの友人が協力して，著者の生前示していた水準が保たれるように努めて下さった．

内外ともに多くの量子力学の教科書が数え上げられる中で，本書の魅力は標題通りその現代的視点であろう．単に新しい事項が書いてあるというだけでない．著者は，今日我々が物理学を理解し，さらに発展させていく上で何が必要であるかを捉え，重要な概念や方法を具体的に提示している．丁寧な記述は互いに関連し合い初心者にも分かり易い．

60余年前に基本が出来上った量子力学は場の理論，素粒子論へと発展する一方，半導体や原子力などの多くの現代の技術を生み出した．ところが今日の進歩した先端的技術は逆にその生みの親である量子論の基礎の検討に用いられている．すなわち当初量子論の原理に関して提唱された紙上の思考実験が、

今は技術的に実現可能となってきて，量子論の本質がより明確になりつつある．その例は本書にもいくつか書かれているが，量子論と今日の技術の結びつきを解説したものとしては、日本物理学会編「量子力学と新技術」培風館 1987，などがある．日本では1983年以降3年毎に，国際シンポジウム“International Symposium on Foundations of Quantum Mechanics in the Light of New Technology（ISQM）”が開かれ，興味深い議論が続いている．このように量子力学は今も新たな視点から検討されているが，最近の発展の一つである「断熱変化と幾何学的位相」に関しては，本書の巻末に簡単な解説を訳者の責任で追加した．

本書の原稿は著者によってほとんどが書かれていたものの，散乱を扱った最終章は残念ながら未完であった．この章を著者がいかに書き終え手を入れて本書をまとめ上げたかは，非常に興味あるところだが今や知ることができない．自ら貴重な時間をさき著者の遺稿を整理，編集されたサン・フー・トゥアン（段三孚）教授は，素粒子論および数理物理学が専門で，現在ハワイ大学の物理学教授である．1932年中国の天津で生まれオックスフォード大学で学び（学士・修士），1958年にカリフォルニア大学バークレー校でPh.D. を授与されている．その後シカゴ大学，ブラウン大学，パデュー大学で研究，教育を重ね1966年より現職に着かれた．

この翻訳を企画してから既に3年余りの歳月が流れ，これほどに出版が遅れたことを皆さんにおわびしたい．原書に散見したミスプリントなどは当然訂正したが，この拙訳の中にさらに誤訳やミスプリントのあることをおそれる．これは全く訳者の責任なので，どうぞご指摘頂きたい．翻訳をお勧め頂き出版への労を取って下さったのは村尾剛先生，松原武生先生である．両先生のご厚情と励ましに深く感謝致したい．また吉岡書店の上川正司氏は怠慢な訳者と根気よくおつき合い下さり，本書の刊行に力を尽くされた．氏のご努力に対し心から謝意を表わしたい．

最後に著者桜井純に関し個人的な思い出を綴らせて頂こう．兄，純は1933年1月，四人兄弟の三男として東京に生まれ，初等・中等教育を日本で受けた．この世代の誰もが体験したように，兄も太平洋戦争の戦禍をこおむった

一人である．戦争末期，中学１年で日光に学童疎開中であった兄は栄養失調となり，しばらく親元へ引取られることになった．その帰路の列車は米軍機から機銃掃射を受け，迎えに行った父ともども座席の下で，飛びまわる銃弾から身を避ける体験をしている．

終戦後それまでは戦闘機の精密画などを描いていた兄は，秋葉原のジャンク屋から放出部品を集めて来てはラジオを組立てるようになり，アマチュア無線に熱中し，平川唯一の英会話に耳を傾けた．当時占領下の日本では英語とともに民主主義の芽を植えつける動きが盛んで，兄の高校にもアメリカから留学生招請の依頼があった．兄は学習院高等科２年の夏その選考を通り，第３代大統領の名を冠したトーマス・ジェファーソン・スクール（セントルイス）に留学した．1949年に敗戦国日本の高校生が渡米するというのは全く珍しいことであり，アメリカ兵の輸送船に乗せられた船旅であった．期間は１年の約束であったが留学の継続を希望した兄は翌年ニューヨーク市のブロンクス科学高校へ転学した．これが彼の生涯の転機となったのであろう．この高校は科学の重点教育では特色があり，同世代の級友からワインバーグ，グラショウはじめノーベル賞級の秀れた物理学者が輩出したことが注目されている．

その後，兄は結局アメリカに留まることになった．ハーバード大学では寮生活を楽しみ，専門の物理学以外に教養科目をも積極的に勉強している．当時日本からの送金は全く許されず，学費は奨学金と休暇中のアルバイトでまかなっていた．給仕や病院の受付をはじめ通訳などをしていた様子である．ハーバードを優等で卒業した1955年夏に，兄は一時帰国し忘れかけていた日本語を思い出して再びアメリカへ戻っていった．進学したコーネル大学院では原子核理論のH.A.ベーテ教授，P.モリソン教授の指導を受けている．「これ程勉強したことは今迄にない」と手紙に書いて来ていたが，３年で学位をとり，続く半年をプリンストンの高等学術研究所で過ごしている．

素粒子論専攻の兄の業績に関して，分野違いの訳者には何も語る資格がない．素粒子の相互作用，とくに対称性を用いた議論が得意であったようだが，ここでは巻頭の編者の言葉をご参考頂きたい．兄は物理学のすべての論文

にJ. J. Sakuraiの名を用いているが，これはJunがアメリカで女性名であることもあってハーバードの学生時代から名乗るようになったものである.

兄は1958年Ph.D.をとってすぐ25歳のとき南部陽一郎先生のご推挙でシカゴ大学の助教授に採用され，1962年に準教授，1964年正教授に昇任した．この間1961年初夏，常藤祝子と結婚したときは“Have a lot of vector mesons!”と友人達に祝われている．当時加速器で新しいベクトル中間子が次々と見出され，兄はこの方面で幾つかの理論上の仕事をしていたからである．この結婚式の立会人となって下さったのは本書の編者である段三孚氏であった．その後1970年，兄はUCLAに移り生涯の勤務先とした．しかし兄は世界のあちこちを飛びまわって研究するタイプであった．日本にもシカゴ時代から機会を見つけて来るようになり，東京大学，名古屋大学などでは大学院の講義をしている.

1981年夏～1982年の夏はフンボルト財団の招きで家族と共にミュンヘンで過ごしていた．1982年はセルン（CERN ヨーロッパ共同原子核研究所）で重要な実験が行われた年であり（ウィークボソンの発見が年末に発表された)，秋以降は家族をカリフォルニアへ帰らせ単身ジュネーブの研究所に残った．ずっと元気に活躍していた由であるが10月の末，週の後半から急に姿が見えなくなったといわれている．心配した同僚が11月1日(月)ジュネーブ近郊フランス領フェルネ・ヴォルテールのアパートを尋ねたときは，既に絶命したあとであった．大動脈瘤破裂の所見であった．享年49歳，働き盛りでの人生の中断である．ジュネーブ，ロサンジェルスの各地で追悼式をあげて頂き，1982年末には東京で葬儀を行い多摩墓地に埋葬した.

早逝した桜井純を記念して設けられた基金には各地から寄附が寄せられ，日本では山口嘉夫先生（代表）のお骨折りで多数の方々のご援助を頂いた．これは現在アメリカ物理学会によって管理され，素粒子物理学部門の賞として，毎年主として若い業績を評価し励ますために使われている.

物理学者として以外の面で，兄は家族を愛し旅を好む人柄であった．スキーをしたり音楽を聴いたり自らもバリトンで歌ったという．自伝風の三文小説を日本の出版社に売り込みに行ったこともある．またなかなかの美食家で

もあり，人生を楽しむことに積極的であった．日本を離れたのは16歳の時であったが，初等・中等教育はしっかりと受けており，漢字などは旧字体しか知らない．

当時の学習院新聞によれば，渡米を前にした高校２年生が「将来は物理学を専攻し，世界市民として世界のために働きたい」と述べている．その少年の夢を兄は半ば果したことであろう．のちになって，万一の場合（一家全滅の事故のとき）は遺産を整理して日米の物理学セミナーを開くようにと指示していた兄は，皆の想像以上に日本の物理学の発展を祈念していたと思う．あらわした本の中でもっとも一般的な本書がこうして日本語になり，さらに広い範囲の方々に読んで頂けるようになったことを，兄は喜んでくれるであろう．

1989年３月　京都にて

桜　井　明　夫

総　索　引

（立体数字は上巻，斜体は下巻を表わす）

カ　行

サ 行

タ　行

マ　行

ヤ　行

ラ　行

ISBN 4-8427-0000-9

訳者紹介
桜　井　明　夫（さくら い あき お）
1962年東京大学理学部物理学科卒
1967～1978年東京大学物性研究所，ベルリン自由大学理論物理学研究所勤務
現在：京都産業大学教授
理学博士

J. J. Sakurai：現代の量子力学（下）　1989 ©
1989年 5 月25日　第 1 刷発行
1995年 5 月25日　第 5 刷発行
訳　者　桜　井　明　夫
発行者　吉　岡　　　誠
〒606 京都市左京区田中門前町87
株式会社　吉　岡　書　店
電話(075)781-4747/振替 京都 01030-8-4624
昭和堂印刷所・池田製本

「物理学叢書」刊行に際して

二十世紀の物理学の進歩は，物質の極微の構造の暴露に，物質の精妙な機構の解明に，驚異的な発展，飛躍をもたらした．その結果，新しい自然力の解放，支配を実現化したばかりでなく，新しい物質の創造，生命の謎への挑戦をも企画せしめつつある．更に，既知の自然力の未曾有の強力な駆使さえ可能にしつつある．二十世紀後半に至って，原子力に，あるいはオートメーションに今や第二の産業革命を喚起せんとするに至った原動力は，物理学の開拓的な創造性によることは言をまたない．更に，現在の物理学は，かつての相対論，量子論の出現にも比すべき革命の前夜にあるといわれているこの時に当たり，物理学の新領域の単なる解説，あるいは時局的な技術書ではなく，真にわが国物理学の発展の糧となるべき良書の出版は緊急の必要事といわねばならぬ．ここに「物理学叢書」を編んで世に送る所以である．

この叢書に収められる原著は，いずれもそれぞれの分野の世界的権威者による定評ある名著に限られるが，前述の精神に鑑みその性格，スタイルに特徴あるものを選ぶと共に，その本質において創造的価値高きものを目標とした．

この叢書が，物理学またはその関連分野へ進む学徒に，よき伴侶として用いられ，真にその血肉となり得ることがわれわれの念願であり，更にこの叢書によって伝えられる海外の学風が，広くわが国の教育，研究へのよき刺戟となり，わが国の明日の科学を築く基礎に貢献するところがあれば幸いである．

(1954年12月)

第 2 期

ゴールドスタイン　瀬川富士他訳 **新版 古典力学** 上下 上 528頁　下416頁	最近，物性物理や素粒子物理を学ぶ人の間に，古典力学はきちんと学ぶべきだという気持が強い．本書は，場の理論から，多体系の物理学を研究する上で，基本的な入門書であり，古典力学を新しい見地から解説．
リープマン，ロシュコ　玉田 珖訳 **気体力学** 512頁	高速流体力学の基礎をできるだけ物理的に記述し，流体運動と流体の物性との結びつきの理解へと読者を導き，反応性気流や稀薄気体の流れなど最近の問題にも適応するすぐれた教科書である．
フレーリッヒ　永宮健夫・中井祥夫訳 **誘電体論** 240頁	誘電率の意味を熱力学的，統計力学的にとらえ，個々の分子の双極子能率と誘電率より固体，気体，溶液などの誘電的性質を統一的観点から記述され，本質を簡潔，かつ完璧にまとめられている．
モット，マッセイ　高柳和夫他訳 **新版 衝突の理論** (全4巻)上Ⅰ・292頁　上・Ⅱ328頁 下Ⅰ・312頁　下・Ⅱ232頁	量子力学の重要な適用対象である衝突理論を丁寧に述べた代表的教科書である．衝突の一般論と，電子衝突，原子と原子の衝突，さらに原子核による核子の散乱など多くの実際問題を扱っている．
パノフスキー，フイリップス　林忠四郎他訳 **新版 電磁気学** 上下 上 288頁　下 296頁	実験物理学，物性理論，素粒子論などを専攻する学生から無比の教科書といわれた旧版を改良し，新しい内容を追加した新版は，電磁気学の教科書として最良のものである．

第 3 期

アイリング他　平井西夫・長谷川繁夫訳 **絶対反応速度論** 上下 上 328頁　下 352頁	分子反応速度論の不朽の名著である本書は，今なお新しい分野を開拓するための手掛りを与えてくれる．化学者のみならず，物理学者，生物学者にとって必読の書であり，反応速度を計算で予測する第一歩を示した．
アブラガム　富田和久・田中基之訳 **核の磁性** 上下 上 336頁　下 416頁	核の磁性を利用すれば凝縮相の局所的状況について新たに様々の詳細が知られる．また実験結果の理論的解釈は統計力学を新しい領域に導いた．その転機に立つユニークな解説書である．
サウレス　松原武生訳 **新版 多体系の量子力学** 296頁	多体問題全体について統一的視点を得るための絶好の入門書．第一版を大幅に改訂し新しい発展が追補された．基本的な事項の簡潔で要領よい記述と，豊富な文献は初学者にも有用である．
ロッシ　中井祥夫他訳 **光学** (合本)568頁	光の波動モデルの立場で基本的な物理概念を啓蒙的に解説した教科書．ホイヘンスの原理が懇切に記述されており，光波の発生も直観的に理解できるよう充分配慮されている．
ウイグナー　森田正人・森田玲子訳 **群論と量子力学** 464頁	原子スペクトルに関する群論の応用を初学者にも理解しやすく平易に解説．最近の原子・原子核・素粒子論に用いるラカー代数や，時間反転まで記述され，ノーベル賞授賞の著者の業績を窺い知れる．

第 4 期

イーゲルスタッフ　廣池和夫・守田　徹訳

液体論入門　288頁

液体の物理的諸現象を理論と実験の両面から捕えた好著である.対象とする液体に金属液体が含まれていること，液体の動的性質も詳しく議論されていることが大きな特徴であり，この分野では稀少な良書である.

セグレ　真田順平・三雲　昂訳

原子核と素粒子 上下　上 480頁　下 448頁

原子核と素粒子を縦横に研究したノーベル物理学者が，実験装置の解説から，それをどのように用いて結果が得られたか，その意味する理論的解釈までを徹底させた好個の入門書である.

パインズ　大槻義彦・三沢節夫訳

固体における素励起
——フォノン・エレクトロン・プラズモンの物理——　320頁

著者によって発展された量子プラズモンの理論は，物性の分野はもとより，宇宙物理・核物理・生物物理などにもとりいれられ，多くの成果を生みつつある．本書はパインズが基礎から説き起こす名講義の教科書.

ロッジ　倉田道夫・尾崎邦宏訳

弾性液体
——大変形レオロジー入門——　456頁

粘弾性とくに非線形粘弾性の理論を，分りやすく解説した名著．ベクトル解析の初歩からレオロジー状態方程式の構成まで，適切な演習問題が与えてあり，また次の段階へ進む用意がなたれ，独習に適している.

フィリップス　川村肇校閲・小松原毅一訳

半導体結合論
——bonds and bands in semiconductors——　384頁

従来の電子論的立場でなく，微視的な荷電子結合を重視して，半導体物理とその応用面を統一的に記述．今後の半導体研究が，工業技術の発展を含めて，当然指向しなければならない方向と指針を与える.

ライフ　中山寿夫・小林祐次訳

統計熱物理学の基礎 上中下　上 388頁　中 352頁　下 248頁

統計力学の基礎概念から応用まで体系的に取扱い，初心者が容易に理解できるよう豊富な例題を駆使して懇切丁寧に解説した学部学生向き教科書の決定版．化学・生物の学生にも理解し易い記述である.

第 5 期

キャレン　山本常信・小田垣孝訳

熱力学 上下　上 248頁　下 216頁

この教科書は従来の歴史的発展に沿った記述を取らず，いくつかの公理に基づいて熱力学を再構築し，論理構造を明確にした．今後の熱力学の発展と飛躍のためにこのようた安定化のもつ意義は深い.

ハーケン　松原武生・村尾　剛訳

固体の場の量子論 上下
——素励起物理学入門——　上 168頁　下 232頁

教養程度の知識のみで，短期間に系統的に場の量子論の方法と固体論への応用を完全に習得できる．上巻では多くの演習問題で理解を早め，下巻では現在の考え方・モデル・方法などが整然と解説されている.

アシュクロフト，マーミン　松原武生・町田一成訳

固体物理の基礎
(全 4 巻)　上・I 304頁　下・I 288頁
上・II 272頁　下・II 280頁

学部生にも大学院生にも使えるよう工夫され，内容の取捨選択がしやすく，種々の目的，異なる水準でもうまく使い分けられる．固体物理学の現象の記述と理論的解析による統一という著者の目標は完全に達成されている.

ド・ジャン　久保亮五監修・高野・中西訳

高分子の物理学
——スケーリングを中心にして——　360頁

全く刷新された最近の高分子物理学の成果を，ド・ジャン自らが平明なスケーリング則の解説と共にまとめた労作である．むつかしい理論に立入らず，スケーリング則とその実験的検証を理解させるという立場を貫いている.

第 6 期

アンダーソン　松原武生訳
凝縮系物理学の基本概念
304頁
凝縮系物理学への深い洞察と透徹した哲学を世に問うた啓蒙書．単なる知識を伝える通常の教科書ではなく，学生にはこれから何を学ぶべきかの指針を，研究者には自己のいる現在点を認識させるまれにみる優れた指導書．

ディラック　喜多秀次訳
ヒルベルト空間のスピノル
120頁
有限 n 次元空間のスピノル理論をみごとな方法で展開した後 $n\to\infty$ を行う．多体フェルミ粒子系・場の量子論・粒子物理学に直接適用可能な形式である．無限次元に固有な事態の生起の指適とその物理的関連の論議を含む．

シュッツ　家・二間瀬・観山訳
物理学における幾何学的方法
328頁
本書は近年理論物理学において，極めて基礎的でかつ有効な数学的手法である微分幾何についての教科書である．概念を中心に分かり易く解説してあり，物理学への応用も示してある．

スタウファー　小田垣　孝訳
浸透理論の基礎
200頁
浸透理論は不規則系の中に作られるクラスターの性質を対象とした極めて汎用性の高い理論であり，本書はその最良の入門書である．スケーリング則や繰り込み群が駆使され，フラクタルや計算機実験にも触れられている．

メンスキー　菅野公男訳
径路の幾何学と素粒子論
504頁
径路の概念を用いて場の量子論の問題をはば広く論じることにより「径路」の概念が場の量子論にとって必要であるだけでなく自然でもあることを強調する．本訳書はソヴィエトで出版されるはずの改訂版に基づいている．

J.J.Sakurai　桜井明夫訳
現代の量子力学 上下
上 392頁　下 320頁
素粒子物理学の独創的理論家であった著者が，ＵＣＬＡでの多年の講義に基づき書き遺した現代的教科書．非相対論的量子力学の核心が，最近の理論・実験の発展に則し，新しい視点から明快かつ具体的に記述されている．

ジョージアイ　九後汰一郎訳
物理学におけるリー代数
―アイソスピンから統一理論へ―
224頁
Glashow と共に $SU(5)$ に基づく素粒子の大統一理論を初めて提唱した著者が，その研究の苦闘の中で体得した豊富な実践的知識を込めて書いた，リー代数とその表現論のわかり易い解説書．

フォスター・ナイチンゲール　原　哲也訳
一般相対論入門
284頁
初学者には難解とも思える一般相対論の内容を，分り易く解き明かしてある．物質の存在が時空を歪め，その曲がりにより重力的現象が起因するという概念を平易，明快に解説．

ジーガー　山本恵一・林　真至・青木和徳訳
セミコンダクターの物理学
上・320頁　下・340頁
電子輸送現象にかなりの頁数を費やしており，企業の研究者にとっても最適である．さらに多くの図面により，物理現象の把握に役立つ．

第 7 期

ゲプハルト・クライ　好村滋洋訳
相転移と臨界現象
378頁
ランダウの相転移論から始まり，先年ノーベル賞の対象となったウイルソンのくりこみ群までを，あまり数式を用いず実験例との対応を明らかにするため，豊富な図表を用いて親しみ易く解説した現代的入門書．

ストルコフ・レヴァニューク　　正田朋幸訳 **強誘電体物理入門** 248頁	強誘電体の相転移を構造相転移の一つとみなし，統一的に基礎的な立場から記述．物質の各論や応用などには殆どふれず，物理的なエッセンスのみを抽出して解説する．両著者ともにこの分野の世界的権威である．
パリージ　　青木　薫・青山秀明訳 **場の理論** ——統計論的アプローチ——　438頁	第一線の研究者の手になる量子場理論の最新の教科書，イジング模型，ランダウ・ギンツブルグ模型等を導入し，相転移の物理を基礎から説き起こす．素粒子論や統計物理を志す学生・院生のための教科書として最適．
キューサック　　遠藤裕久・八尾　誠訳 **構造不規則系の物理** 上下 上 286頁　下 282頁	構造不規則系の研究は物理学の魅力ある分野である．本書は構造不規則系の静的・動物構造，電子状態，またその応用について，実験，理論両面にわたる初めての総合的な教科書．
J.D.Jackson　　西田　稔訳 **ジャクソン電磁気学** 上下 （原書第２版）　上 648頁　下 480頁	標準的教科書として世界的に著名なジャクソンの原書第２版の翻訳．理論物理学，実験物理学，天体物理学，プラズマ物理学に関心をもつ学生，研究者に必携の書．第２版において更に最新の内容に充実，完成された．
アブリコソフ　東辻千枝子・松原武生訳 **金属物理学の基礎** 上下 上 376頁　下 332頁	この分野で世界をリードしてきた著者が固体電子論の立場から集大成した．メソスコピック系や高温超伝導・セラミックスなども明快に解説されていおり，特に量子効果がマクロに観測される領域の部分は圧巻である．

別　巻

井上　健監修・三枝寿勝・瀬藤憲昭著 **量子力学演習** ——シッフの問題解説——　392頁	理論的基礎に重点をおきながら，実験・技術を志ざす学生にも容易に理解できる演習書たるべく，代表的教科書として定評あるシッフの同書より，章末の各問題を詳細に解説した．
井上　健監修・瀬藤憲昭・吉田俊博著 **古典力学の問題と解説** ——ゴールドスタイン(第2版)に基づいて——　434頁	近代的な量子力学・場の理論・物性論を学ぶ際の踏み台として，古典力学を新しい見地から解説された，一般力学の標準的教科書と，誉れの高いゴールドスタイン（第２版）の章末の問題を詳細に解説した最新の演習書．
大槻義彦監修・飯高敏晃他著 **演習現代の量子力学** ——J.J. サクライの問題解説——　336頁	本書は，J.J. サクライの教科書「現代の量子力学」の章末問題の解説である．この解説は1991年度，早稲田大学の物理学科，応用物理学科のはじめて量子力学を学ぶ学部３年生を対象に行った演習に基づいている．

生物物理から見た生命像１． **蛋白質—この絶妙なる設計物** 赤坂一之 編　146頁	わかりやすさ・親しみやすさを重視して，これから学問を始めようとする人に，蛋白質の「自然による絶妙な設計物」としてのおもしろさを伝える．